



**Казанский федеральный
УНИВЕРСИТЕТ**

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**V ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ШКОЛЫ-
КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ**

«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



Координационный совет по делам молодежи в научной и образовательной сферах при Совете при Президенте Российской Федерации по науке и образованию



Казань, 30 ноября-2 декабря 2022 года

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

V ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ШКОЛЫ-
КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ

«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



Сборник Тезисов V Всероссийской с международным участием школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В. Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: КФУ, 2022. – 1 USB-flash-накопитель. – Систем. требования: ПК с процессором с тактовой частотой не менее 2 ГГц; Windows 8; USB 2.0; Adobe Acrobat Reader.

Казань, 30 ноября-2 декабря 2022 года

Организатор

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Организационный комитет

Председатель организационного комитета:

Таюрский Д.А., первый проректор – проректор по научной деятельности КФУ.

Со-председатели и координаторы организационного комитета:

Абрамский М.М., директор Института информационных технологий и интеллектуальных систем КФУ;

Гафуров М.Р., директор Института физики КФУ;

Зиганшин М.А., директор Химического института им. А.М. Бутлерова КФУ;

Киясов А.П., директор Института фундаментальной медицины и биологии КФУ, проректор по биомедицинскому направлению;

Нургалиев Д.К., директор Института геологии и нефтегазовых технологий КФУ, проректор по направлениям нефтегазовых технологий, природопользования и наук о Земле;

Чикрин Д.Е., директор Института вычислительной математики и информационных технологий КФУ.

Члены организационного комитета:

Абгарян Г.В.

Билялов А.И.

Валиев И.Ф.

Валиева Л.Р.

Варфоломеев М.А.

Вахитов И.Р.

Галиханова У.А.

Герасимов А.В.

Дьяконова Т.В.

Ильин А.В.

Каюмов А.Р.

Кольчугин А.Н.

Райманова М.А.

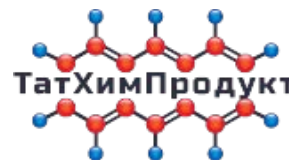
Хайдаров А.А.

Челнокова И.А.

Партнеры конференции



Координационный совет по делам молодежи в научной и образовательной сферах при Совете при Президенте Российской Федерации по науке и образованию



СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1 МЕДИЦИНА.....	5
СЕКЦИЯ 2 БИОТЕХНОЛОГИЯ.....	63
СЕКЦИЯ 3 ХИМИЯ.....	87
СЕКЦИЯ 4 ЭНЕРГЕТИКА.....	245
СЕКЦИЯ 5 СОВРЕМЕННЫЕ ИТ-ТЕХНОЛОГИИ, РОБОТОТЕХНИКА И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.....	255
СЕКЦИЯ 6 ДИЗАЙН, СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ, МЕЗО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ	270

СЕКЦИЯ 1 МЕДИЦИНА

OPTIMIZATION OF TREATMENT CONDITIONS OF NEURAL CELLS WITH HOMOCYSTEINE TO MODEL OXIDATIVE STRESS

A. Raghad, R.A. Ishkaeva, M.V. Esmeteva, A.V. Yakovlev, G.F. Sitdikova, T.I. Abdullin

Kazan (Volga Region) Federal University, Kazan, Russia

rag.rsh997@gmail.com

Establishment of neural cell models with oxidative stress (OS) is a relevant task for screening and studying neuroprotective compounds. Among the chemical agents used for OS induction, homocysteine is of considerable interest due to its pathological role in cardiovascular and neurodegenerative diseases. Previous studies has proved exogenic homocysteine as a cytotoxic and ROS-generating compound in neural cells [1]. Cyclized derivative of homocysteine, namely, DL-homocysteine thiolactone (HCTL) can be used instead due to its increased stability, often making this derivative preferable to model OS [2].

This work was aimed at the optimization of treatment conditions of neural cells with HCTL to trigger physiologically relevant OS. Human neuroblastoma cells (SH-SY5Y line) was pre-cultured under standard conditions and seeded in 24-well plates prior the analysis. The cells were exposed to HCTL at different concentrations (~100–1000 μM) and cultured for different time. Intracellular ROS levels were detected by flow cytometry with MitoSOX and DCFH-DA fluorescent probes for mitochondrial and cytoplasmic ROS respectively. The conditions were ascertained, under which ROS production in the cells increased by up to 50%. Furthermore, preliminary study of the antioxidant effect of model tetrapeptides based on alternating aromatic and cationic amino acids (Tyr-Arg-Phe-Lys derivatives) was carried out in order to optimize the way of cell treatment with the prooxidant and antioxidant compounds. The results can be used to assess antioxidant peptides and other cytoprotective compounds under OS-mimicking conditions.

This work was supported by Russian Science Foundation (project 20-73-10105) and by the subsidy allocated to Kazan Federal University for the state assignment in the sphere of scientific activities (project FZSM-2022-0020).

1. Wang D. et al., *Neurosci. Lett.*, 2016, 635, 24–32.
2. Shalayel I., Vallée Y., *Life*, 2019, 9(2), 40.

ХАРАКТЕРИСТИКА СИНТЕТИЧЕСКОГО ГИДРОГЕЛЯ В КАЧЕСТВЕ МАТРИКСА ДЛЯ НЕЙРОНАЛЬНЫХ КЛЕТОК

С.М. Авдокушина, К. Даиоб, М.И. Камалов, Т.И. Абдуллин, М. Зухайб

*Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский федеральный университет,
Казань, Россия*

sveta.avdokushina@gmail.com

Одним из основополагающих подходов к терапии повреждений нервных тканей является применение биоматериалов, способных замещать область повреждения и стимулировать процессы регенерации. Среди подобных биоматериалов перспективными являются синтетические гидрогели, имеющие хорошо контролируемые физико-химические и биохимические свойства.

В работе исследовано поведение клеток феохромоцитомы крысы РС-12 и нейробластомы человека SH-SY5Y в составе катионизированного пористого гидрогеля на основе производного полиэтиленгликоля – олиго(полиэтиленгликоль)фумарата (ОПФ). Получены образцы гидрогелей на основе ОПФ разного состава, изучены их гидратационные, вязко-упругие свойства и визуализирована их структура методом лазерной сканирующей конфокальной микроскопии.

По результатам тестов на адгезию и пролиферацию установлено, что введение в состав гидрогелей катионного компонента существенно повышает эффективность закрепления клеток и их пролиферативную активность по сравнению с неcatiонизированным материалом. Кроме того, с использованием микроскопических методов охарактеризованы процессы миграции и морфология клеток при взаимодействии с гидрогелями. Результаты свидетельствуют о том, что катионизированный гидрогель на основе ОПФ является перспективным матриксом для нейрональных клеток и представляет интерес для дальнейших исследований при нейротравмах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 22-74-00082 и за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект FZSM-2022-0020).

ЭКСПРЕССИЯ И ОЧИСТКА ФЕРМЕНТА ДЕЗОКСИГИПУЗИНСИНТАЗА *CANDIDA ALBICANS* И АНАЛИЗ ЕГО АКТИВНОСТИ

Э.Э.К. Агбоигба, А.Ф. Юсупова, К.С. Усачев, Ш.З. Валидов

Казанский приволжский федеральный университет, Казань, Россия

kouranelvis@gmail.com

Candida albicans (*C. albicans*) является грибковым патогеном, вызывающим широкий спектр слизистых и системных инфекций особенно у лиц с ослабленным иммунитетом. По сравнению с разработкой противобактериальных препаратов, разработка противогрибковых препаратов сталкивается с фундаментальной проблемой, поскольку грибковые патогены филогенетически ближе к своим хозяевам по строению молекул-мишеней антимикробных веществ [1], поэтому поиск селективного и менее токсичного лечения против *C. albicans* необходим. Одним из новых подходов к решению проблемы является регуляция трансляции и механизмов, с ней связанных, например, гипузинирование. Гипузинирование – это пост-трансляционная модификация эукариотического трансляционного фактора 5а, в ходе которой из специфического остатка лизина образуется необычная аминокислота гипузин. Реакция катализируется ферментами дезоксиhipузинсинтазой (DHS) и дезоксиhipузингидроксилазой (DOHN) в присутствии кофактора NAD⁺ и спермидина [2]. Данная работа посвящена экспрессии фермента DHS *C. albicans* и изучению его функциональной активности. Ген DHS (CaALFM-C302180CA) амплифицировали из геномной ДНК штамма *C. albicans* SC5314 и его клонировали в плазмидный вектор pETGB1a. Полученный растворимый белок 6xHis-GB1-DHS подвергли очистке методом гель-фильтрационной хроматографии, в результате чего был получен образец чистого DHS. Высокоочищенный белок снимали методом малоуглового рентгеновского рассеяния для подтверждения нативной формы белка. Смесь, состоящая из: DHS с своим субстратом EIF5A, спермидина и NAD инкубировали при 25°C и измеряли поглощения NADH, образованного в ходе реакции при длине волны 340 нм.

DHS *C. albicans* представляет собой гомотетрамер (168КДа) из четырёх субъединиц по 42 КДа. Экспрессируемый белок в *E. coli* является нативным ферментом, сохранившим свою функциональную активность. Выделенный DHS позволит получить кристаллы, с помощью которых можно анализировать структурные данные для поиска потенциальных путей ингибирования белоксинтезирующего аппарата *C. albicans*.

1. Roemer T. and Krysan D.J. *Cold Spring Harb Perspect Med*, 2014, a019703
2. Wator E., *Biomolecule*, 2020, 10, 522.

АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЕ ДЕЙСТВИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ОТНОШЕНИИ ОРАЛЬНЫХ ИЗОЛЯТОВ *ROTHIA DENTOCARIOSA* И *NEISSERIA MUCOSA*

Д.Ф. Аитова^а, Т.Ю. Ширяк^б, Л.Т. Баязитова^б, М.А. Харитонова^а

^а ФГАОУ ВО Казанский федеральный университет, Казань, Россия

^б ФГБОУ ВО Казанский ГМУ Минздрава России, Казань, Россия

daniaaitova16@gmail.com

Представители родов *Rothia* и *Neisseria* являются частью нормальной микрофлоры ротоглотки и верхних дыхательных путей человека. При этом *R.dentocariosa* ассоциирована с кариесом зубов и заболеваниями пародонта. Представители данного вида обладают адгезивными свойствами и способностью к образованию коаггрегатов, принимая непосредственное участие в формировании зубного налета. Повреждения тканей ротоглотки могут быть причиной поражения других тканей и органов. Так, описаны клинические случаи эндокардитов, вызванных как *Rothia dentocariosa*, так и *Neisseria mucosa*.

Было исследовано антибактериальное действие наночастиц серебра в отношении планктонных клеток *R. dentocariosa* и *N. mucosa*, а также биопленок, формируемых данными микроорганизмами. Ag/PVP – раствор наночастиц серебра в воде, стабилизированных катионным полимером поливинилпирролидоном. Штаммы *R.dentocariosa* S2 и *N.mucosa* S1 были выделены из образца зубного налета, видовая принадлежность установлена с помощью масс-спектрометрического анализа. Минимальные ингибирующие концентрации (МИК) оценивали визуально и нефелометрически, измеряя оптическую плотность при длине волны 590 нм, также производили определение жизнеспособности бактериальных клеток с использованием редуктазной пробы с резазурином. МИК Ag/PVP для *R. dentocariosa* S2 и *N. mucosa* S1 составили 25,0 мкг/мл, 12,5 мкг/мл, соответственно. МИК смешанной культуры – 50 мкг/мл. Для оценки способности бактерий образовывать биопленки был проведен анализ связывания бактериальных клеток с кристаллическим фиолетовым. Смешанные биоплёнки были в 1.4 – 1.5 раза плотнее и прочнее, по сравнению с биопленками, образованными только *R. dentocariosa* S2 или *N. mucosa* S1. Под воздействием Ag/PVP наблюдалось снижение уровня образования биопленок, при этом смешанные биопленки проявили наибольшую устойчивость.

СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИС-АММОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДОКСИНА И ЖИРНЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

А.С. Акчуриц, Н.В. Егорова, С.В. Сапожников, Е.С. Булатова, М.Н. Агафонова,
Н.В. Штырлин, Ю.Г. Штырлин

НОЦ фармацевтики КФУ, Казань, Россия

ASAkchurin@stud.kpfu.ru

Ранее в систематических исследованиях нашей группы было показано, что введение в различные положения пиридоксина (витамина В₆) четвертичных аммониевых фрагментов, а также фрагментов жирных карбоновых кислот позволяет получать соединения, обладающие высокой антибактериальной активностью, а также низкой токсичностью *in vitro* и *in vivo* [1].

В продолжение данных исследований в настоящей работе в 4-6 стадий были получены 37 бис-аммониевых соединений, содержащих в составе амидные или сложноэфирные фрагменты жирных карбоновых кислот (схема 1).

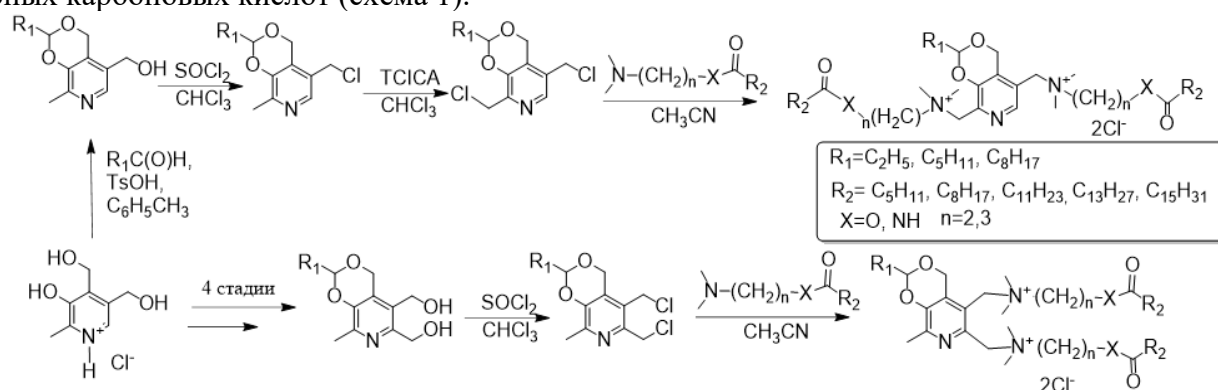


Схема 1. Синтез ЧАС на основе производных пиридоксина

Исследования антибактериальной активности на 22 музейных и клинических штаммах бактерий, а также токсичности на условно-нормальных клетках *in vitro* показали, что некоторые из полученных соединений обладают сопоставимой с коммерческими антисептиками (мирамистином, бензалкония хлоридом и хлоргексидином) активностью (МИК=2-4 мкг/мл), но при этом более низкой токсичностью.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения проектной части государственного задания в сфере научной деятельности №0671-2020-0053.

1. Sapozhnikov S.V., Sabirova A.E., Shtyrilin N. V., Druk A.Y., Agafonova M.N., Chirkova M.N., Kazakova R.R., Grishaev D.Y., Nikishova T. V., Krylova E.S., Nikitina E.V. Kayumov A.R., Shtyrilin Y.G., *Eur. J. Med. Chem.* 2021, 211, p. 113100.

ЦИТОТОКСИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕХАНИЗМЫ ДЕЙСТВИЯ ДИКАТИОННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

С.К. Амерханова^а, А.Д. Волошина^а, А.Б. Миргородская^а, В.А. Михайлов^б, Л.Я. Захарова^а

^а *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*

^б *Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко, 83114, Донецк,
syumbelya07@mail.ru*

Катионные поверхностно-активных вещества (ПАВ) проявляют широкий спектр биологических свойств: эти соединения способны взаимодействовать и образовывать комплексы со многими белковыми молекулами, нуклеиновыми кислотами, показывают низкую цитотоксичность в отношении здоровых клеток.

Объектами исследований являлись дикатионные алкилимидазолиевые ПАВ. В настоящей работе была исследована цитотоксичность соединений в отношении условно-нормальных и опухолевых клеточных линий человека с помощью Cytell Cell Imaging system. Воздействие исследуемых соединений на клеточную линию аденокарциномы двенадцатиперстной кишки (HuTu 80) изучали при помощи клеточного анализатора xCELLigence RTCA в режиме реального времени. Влияние соединений-лидеров на индукцию апоптоза и изменения клеточного цикла исследовали методом проточной цитометрии. Далее с целью определения возможности протекания апоптоза по митохондриальному пути и сопутствующей индукции генерации активных форм кислорода (АФК) была проведена проточная цитометрия и флуоресцентное микроскопирование. Апоптотические эффекты в клетках Hutu80, обработанных соединениями-лидерами также изучали с помощью набора магнитных частиц 7-Plex Early Apoptosis; ДНК-повреждающую активность соединений исследовали с помощью набора MILLIPLEX® MAP 7-plex DNA Damage / Genotoxicity Magnetic Bead.

Результаты работы свидетельствуют о том, что исследуемые соединения проявляют селективное цитотоксическое действие в отношении клеточной линии HuTu80. Цитотоксический эффект тестируемых веществ характеризуется усиленной генерацией клеткой АФК, индукцией апоптоза по внутреннему пути, связанному с нарушением функции митохондрий и задержкой клеточного цикла в фазе G1/G0.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 19-73-30012.

ОЦЕНКА СПОСОБНОСТИ БРОМЕЛИНА ИММОБИЛИЗОВАННОГО НА ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ХИТОЗАНА РАЗРУШАТЬ БАКТЕРИАЛЬНЫЕ БИОПЛЕНКИ

Д.Р. Байдамшина^а, С.С. Гончарова^б, М.Г. Холявка^б, А.Р. Каюмов^а

^а Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань, Россия

^б Медико-биологический факультет ВГУ, Воронеж, Россия

prosto-di@mail.ru

Pseudomonas aeruginosa и *Staphylococcus aureus* часто вызывают хронические и резистентные инфекции в значительной степени из-за их способности образовывать биопленки. Образование биопленки позволяет этим организмам противостоять антибактериальным воздействиям, в отличие от свободноживущих клеток бактерий.

В работе исследовали разрушение биопленок, образованных стафилококком золотистым и синегнойной палочкой бромелином как растворимым, так и иммобилизованным на производных хитозана.

Для этого в 24-х луночных планшетах выращивали бактерии в течение 48-часов до образования биопленки, после чего обрабатывали 3 или 24 часа раствором бромелина (0.1 и 0.5 мг/мл) или ферментом, иммобилизованным на водорастворимых производных хитозана – карбоксиметилхитозана, сульфат хитозана и ацетат хитозана. Количество гетерогенного фермента соответствовало 0.1 и 0.5 мг/мл растворимого фермента, а в качестве отрицательного контроля были взяты чистые носители в аналогичных концентрациях. Остаточные биопленки окрашивали кристаллическим фиолетовым. Растворимый бромелин разрушал биопленки, образованные как *P. aeruginosa*, так и *S. aureus*. Среди всех вариантов производных хитозана только карбоксиметилхитозан продемонстрировал соответствующие результаты, а бромелин иммобилизованный на карбоксиметилхитозане привел к значительному уменьшению биопленок обоих патогенов. Сульфат хитозана и ацетат хитозан в обеих формах приводили к ложноотрицательным результатам, по-видимому, из-за неспецифического прилипания на поверхности планшетов.

Таким образом, иммобилизованный бромелин на карбоксиметилхитозане может применяться для разрушения бактериальных биопленок.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ-21-74-20053.

ОЦЕНКА ЭКСПРЕССИИ БЕЛКОВ-РЕГУЛЯТОРОВ АУТОФАГИИ ПОД ВЛИЯНИЕМ ДЕКСАМЕТАЗОНА В ЛИМФОЦИТАХ БОЛЬНЫХ ТЯЖЕЛОЙ ФОРМЫ АТОПИЧЕСКОЙ БРОНХИАЛЬНОЙ АСТМЫ

А.А. Богомазова, Ю.В. Скибо, Б.Р. Ибрагимов, И.Д. Решетникова, З.И. Абрамова

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

arnbgmz@yandex.ru

Актуальность исследований программированной клеточной гибели (ПКГ) определяется взаимосвязью нарушения ее регуляции с большинством заболеваний, в частности, с атопической бронхиальной астмой (АБА), характеризующейся воспалением дыхательных путей и инфильтрацией Т-лимфоцитов. Несмотря на доказанное влияние нарушения ПКГ на течение АБА, действие синтетических глюкокортикоидов на аутофагию (ПКГ II типа) до сих пор не изучено [1]. Данное исследование демонстрирует влияние дексаметазона на экспрессию основных белков-регуляторов аутофагии и может помочь определить терапевтические мишени, эффективно контролируемые тяжелые астматические реакции. В качестве объекта исследования были использованы лимфоциты периферической крови 15 здоровых доноров и 15 пациентов с тяжелой формой АБА. Аутофагия оценивалась на основе экспрессии белков Bcl-2, Beclin1, VPS34 и мембрано-связанной формы белка LC3 (LC3-II) с помощью вестерн-блот анализа и выявления аутофагосом и лизосом флуоресцентной микроскопией. Было установлено, что при длительном культивировании лимфоцитов наблюдается повышение содержания Bcl-2, Beclin1, VPS34 и LC3-II белка у больных АБА. Результаты конфокальной микроскопии показали низкое содержание аутофаголизосом у больных АБА по сравнению со здоровыми донорами, что является одним из основных факторов развития аллергического воспаления [2]. Дексаметазон не оказывал влияния на начальные этапы аутофагии, но стимулировал последующие стадии, в частности усиление перехода белка LC3 во II изоформу и образование аутофаголизосом у больных АБА.

1. Ichimiya T., Yamakawa T., Hirano T., Yokoyama Y., Hayashi Y., Hirayama D., et al., *Int J Mol Sci.*, 2020, 21, 8974.
2. Theofani E., Xanthou G., *Int J Mol Sci.*, 2021, 22, 12, 6314.

ПЕРВИЧНЫЙ СКРИНИНГ ПРОДУЦЕНТОВ ФИБРИНОЛИТИЧЕСКИХ И ПЛАЗМОКОАГУЛИРУЮЩИХ ФЕРМЕНТОВ СРЕДИ МИКРОМИЦЕТОВ ОТДЕЛА *MUCOROMYCOTA*

М.А. Богущ, А.А. Осмоловский

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

margaritabogush@mail.ru

Микроскопические грибы способны к образованию протеолитических ферментов различной природы, что обусловлено их сапротрофным типом питания. Протеолитические ферменты востребованы во многих сферах, в том числе и в медицине, как ферменты с фибринолитической и плазмокоагулирующей активностью. Некоторые представители родов *Rhizomucor* и *Mucor* уже описаны как продуценты подобных ферментов, поэтому перспективно продолжать исследования в этой области среди зигомицетов.

Было использовано 23 вида зигомицетов из родов *Absidia*, *Actinomucor*, *Circinella*, *Cunninghamella*, *Gongronella*, *Mortierella*, *Mucor*, *Mycotypha*, *Rhizomucor*, *Syncephalastrum*, *Thamnostylum*, *Umbelopsis* и *Zygorhynchus*, выделенных из почв и растительных остатков Красноярского края, Волгоградской и Калужской областей, Архыза, Монголии и Вьетнама. Культивирование микромицетов проводили на жидкой среде, содержащей (в %): казеин – 1.0, пептон – 0.5, KH_2PO_4 – 0.05, MgSO_4 – 0.025, в дальнейшем работали с культуральной жидкостью, содержащей экзоферменты микромицетов. Способность к фибринолитической и активаторной к плазминогену активности определяли методом фибриновых пластин. Для определения потенциальной плазмокоагулирующей активности культуральную жидкость инкубировали с разведённой в 2 раза плазмой. В результате было показано, что 6 видов – *A. spinosa*, *Ac. elegans*, *C. elegans*, *C. echinulata*, *S. racemosum* и *Z. moelleri* - обладали выраженной активаторной к плазминогену и фибринолитической активностью, 11 видов проявляли плазмокоагулирующую активность в различной степени, 4 вида – *A. corymbifera*, *M. circinans*, *M. plumbeus* и *T. piriforme* продемонстрировали наиболее выраженную плазмокоагулирующую активность. Результаты первичного скрининга дают основания предполагать, что мукоровые грибы являются потенциальными продуцентами высокоэффективных ферментов тромболитического действия, которые теоретически возможно применять в препаратах данного спектра действия.

ПОЛУЧЕНИЕ ПЛАЗМИДНОЙ КОНСТРУКЦИИ ДЛЯ ГЕТЕРОЛОГИЧНОЙ КОЭКСПРЕССИИ ГЕНОВ *EIF5A*, *DHS* И *DOHH* С *ALBICANS* В *E. COLI*

Валиахметов Э.Э., Агбоигба Э.Э.К., Валидов Ш.З.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

emlvaliakhmetov@gmail.com

Одним из наиболее распространенных патогенов человека является мицелиальный дрожжевой гриб *Candida albicans*. Штаммы *C. albicans* обнаруживаются у 70% людей и способна вызывать трудно излечимые инфекции – кандидозы. Низкая специфичность антимикотиков и, как следствие, большое количество побочных эффектов обуславливает необходимость изучения физиологических механизмов *C. albicans* для поиска новых высокоселективных мишеней. Одними из таких мишеней являются ферменты биосинтеза гипузина: DHS (deoxyhypusine synthase) и DOHH (deoxyhypusine hydroxylase). Гипузинирование – уникальная посттрансляционная модификация, встречающаяся у высококонсервативного эукариотического фактора трансляции (eIF5A), является необходимой для проявления данным белком своих функций. Для исследования взаимодействия белков, а также получения кристаллической структуры модифицированного eIF5A необходимо произвести гетерологичную коэкспрессию данных белков в *E. coli*. Для этого нами была разработана плазмидная конструкция на основе векторной системы pACYCduet-1 имеющая два множественных клонирующих сайта (МКС), контролируемых двумя T7 промоторами, и селективный маркер. На первом этапе гены *dhs* и *dohh* *C. albicans* были поочередно клонированы в МКС1 и МКС2 соответственно вектора pACYCduet1. Затем из полученной конструкции вырезали фрагмент, содержащий целевые гены, и клонировали в МКС1 исходного вектора pACYCduet-1. В свободный МКС2 затем клонировался ген *eif5a* *C. albicans*. Далее из полученной конструкции pACYCDuet-1:*dhs:dohh:eif5a* вырезали полицистронный фрагмент *dhs:dohh:eif5a* и клонировали в экспрессионный вектор pET28a, содержащий афинный тег для дальнейшей эффективной очистки на хроматографической колонке. Полученная конструкция позволяет выделить модифицированный eIF5A за счет его коэкспрессии с ферментами-модификаторами в экспрессионных штаммах *E.coli*. Экспрессия белков DHS, DOHH и eIF5A подтверждена с помощью электрофореза клеточного супернатанта после лизиса и центрифугирования индуцированной культуры. Дальнейшая работа будет направлена на получение кристаллов гипузинированного eIF5A, полученного при коэкспрессии.

АНАЛИЗА ПРОГРАММИРУЕМОЙ КЛЕТочНОЙ ГИБЕЛИ (АПОПТОЗА И АУТОФАГИИ) ЛИМФОЦИТОВ РЕКОНВАЛЕСЦЕНТОВ

Э.И. Вахитова, З.И. Абрамова

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

vakhitova2607@mail.ru

Коронавирусы являются группой вирусов, вызывающие различные заболевания средней и тяжелой степени тяжести, в частности поражение дыхательных путей и желудочно-кишечного тракта. РНК-вирус SARS-CoV-2 содержит крупный геном и имеет высокую репликативную активность из-за консервативной геномной организации [1]. Глобальное распространение данного вируса предполагает детальное изучение механизмов его влияния на клетки иммунной системы. В частности, могут появляться изменения в протекании других клеточных процессов, например, программируемой клеточной гибели (апоптоз - ПКГ I типа и аутофагия - ПКГ II типа) – процессах, отвечающих за клеточный гомеостаз и нормальное функционирование клеток, в том числе иммунной системы. В настоящее время имеются данные об изменении активности апоптоза в клетках, пораженных вирусом SARS-CoV-2 [2]. Однако мало данных о роли аутофагии (рисунок 1) в регуляции функций клеток иммунной системы.



Рисунок 1 - Многоступенчатые процессы аутофагии [3].

Целью данного исследования является оценка экспрессии белков апоптоза (Bcl-2, Caspase-3) и аутофагии (LC3-I и II) в лимфоцитах (ЛФ) доноров в норме и у переболевших COVID-19 (реконвалесцентов). Ранее при культивировании клеток в процессе оценки пролиферативной активности, выявили в ЛФ снижение антиапоптотического белка Bcl-2 на фоне повышения активности белка образования фагофора аутофагосом (Beclin-1). Исходя из этого, мы оценили уровни экспрессии других белков - маркера апоптоза (Caspase-3) и маркера аутофагии (LC3). И установили, что в свежесобраных ЛФ (0 суток) здоровых доноров уровень цитоплазматического белка LC3-I (рисунок 2, А) превышал уровень белка аутофагосомы LC3-II (рисунок 2, А; рисунок 1).

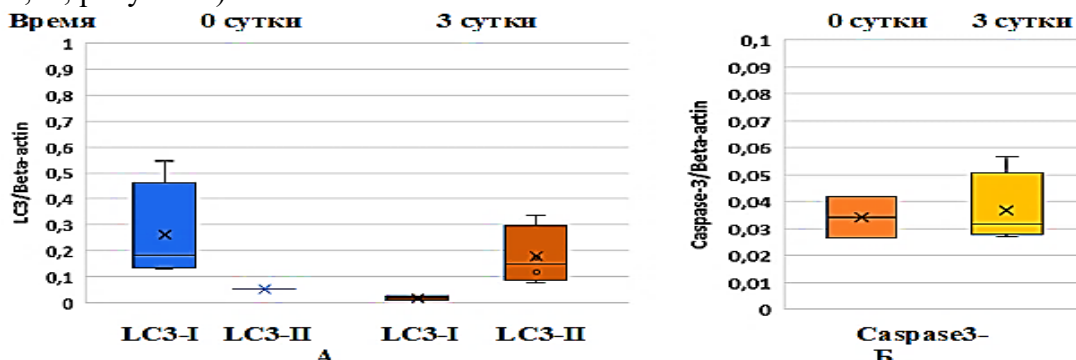


Рисунок 2 – Оценка уровня экспрессии аутофагического LC3-белка (А) и апоптотического белка Caspase-3 (Б) в лимфоцитах здоровых доноров в процессе культивирования на протяжении 3 суток.

Следует отметить, что на 3 сутки уровень экспрессии белка инициации LC3-I снижается на фоне достоверного повышенного уровня белка аутофагосомы. При этом в части клеток на 3 сутки повышается активность апоптоза, о чем свидетельствует повышение уровня Caspase-3 (рисунок 2, Б). В группе реконвалесцентов в свежесыведенных ЛФ повышение уровня LC3-I указывает на нормальную активацию процесса аутофагии в богатой питательной среде, но на 3 сутки на фоне голодания мы видим статистически значимое повышение уровней LC3- I, LC3-II белков (рисунок 3).

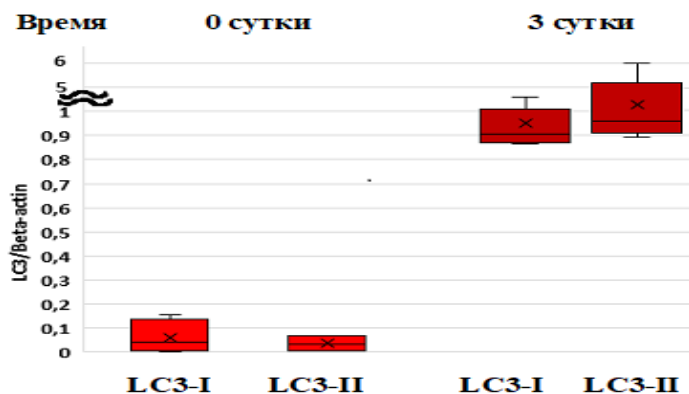


Рисунок 3 – Оценка уровня экспрессии аутофагического LC3-белка в лимфоцитах реконвалесцентов в процессе культивирования на протяжении 3 суток.

Повышенный уровень LC3-II, а также уменьшение соотношения LC3-I/LC3-II реконвалесцентов может свидетельствовать о нарушении слияния аутофагосом и лизосом и, следовательно, незавершенной аутофагии (рисунок 3).

Полученные результаты экспрессии аутофагических белков могут свидетельствовать о нарушении процесса аутофагии в группе реконвалесцентов. Полученные данные требуют дальнейшего исследования ввиду роли аутофагии не только в процессе клеточного гомеостаза, но в развитии заболеваний.

1. Umakanthan, S. Origin, transmission, diagnosis and management of coronavirus disease 2019 (COVID-19) / S. Umakanthan, P. Sahu, A. V. Ranade, M. M. Bukelo // *Postgrad Med J.* – 2020. – V.96. – P. 753-758.
2. Liu, Y. Cell-Type Apoptosis in Lung during SARS-CoV-2 Infection / Y. Liu, T. M. Garron, Q. Chang, Z. Su, C. Zhou, Y. Qiu, E. C. Gong, J. Zheng, Y. W. Yin, T. Ksiazek // *Pathogens.* – 2021. – V.10. – P. 509.
3. Сорокина, И.В. Роль митохондрий в регуляции митотической катастрофы: диссертация кандидата биологических наук / И. В. Сорокина, 2017. – 182 с.

ЦИТОТОКСИЧЕСКОЕ ДЕЙСТВИЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ НА КЛЕТКИ ЭПИДЕРМОИДНОЙ КАРЦИНОМЫ А431

П.Д. Вепрева, П.В. Зеленихин

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

vepreva.polina@gmail.com

Пиллар[*n*]арены являются перспективными макроциклическими соединениями для использования в биологии и медицине благодаря их биосовместимости, легкой модификации целевых свойств и низкой токсичности известных соединений этого класса. Возможности современной супрамолекулярной химии позволяют создать пилларарены с определенными молекулярными характеристиками, что позволяет рассматривать их как перспективные агенты или носители при терапии различных заболеваний. Для использования в медицине необходимо, чтобы пилларарены были химически стабильны в физиологических условиях и не проявляли токсичности. В связи с вышесказанным, целью настоящей работы стала оценка цитотоксического действия пиллараренов, полученных с применением разных методик, по отношению к клеткам эпидермоидной карциномы А431.

В работе использовались различные образцы пиллараренов: АUI-87, АUI-97, АUI-156, любезно предоставленные группой проф. д. х. н. Стойкова И. И. (Химический институт им. А. М. Бутлерова, К(П)ФУ). Данные образцы имеют сходное строение основного макроцикла, но различаются по функциональным группам. Пилларарены АUI-87 и АUI-156 модифицированы сульфонатными группами, АUI-156 дополнительно несет флуоресцеиновый фрагмент; АUI-97 модифицирован карбоксилатными группами.

Установлено, что пиллар[5]арены АUI-87, АUI-97, АUI-156 не имеют выраженного цитотоксического эффекта на клетки А431 в исследованном диапазоне концентраций 0.5 мкг/мл – 100 мкг/мл. Пилларарены АUI-87, АUI-97, АUI-156 также не обладают достоверным апоптозиндуцирующим действием на клетки А431 в концентрации 100 мкг/мл. Доля клеток в состоянии апоптоза составила 6.56 %, 6.93 %, 8.5 % для пиллар[5]аренов АUI-87, АUI-97, АUI-156, соответственно, в то время как в варианте без обработки значение данного показателя составило 5.33 %. Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о биосовместимости протестированных макроциклов и закладывают основу для дальнейшего применения данных пиллараренов в биомедицинских исследованиях и приложениях. Благодаря отсутствию у них токсического действия, данные пилларарены, обладающие широкими возможностями функционализации, могут быть перспективной платформой для создания систем целенаправленной доставки терапевтических агентов.

КО-ЭКСПРЕССИЯ ФАКТОРОВ РОСТА VEGF И FGF2 В ЭНДОТЕЛИАЛЬНЫХ КЛЕТКАХ ИЗ ПУПОЧНОЙ ВЕНЫ ЧЕЛОВЕКА, ОПОСРЕДОВАННАЯ МУЛЬТИЦИСТРОННЫМИ КОНСТРУКЦИЯМИ

Д.З. Гатина, Е. Е. Гаранина, М. Н. Журавлева, И.И.Салафутдинов

*Казанский федеральный университет,
Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия*

gatina_dilara@mail.ru

Эндотелиальные клетки формируют стенки кровеносных сосудов и секретируют паракринные факторы, участвующие в ангиогенезе и регенерации тканей [1]. Фактор роста эндотелия сосудов (VEGF) и фактор роста фибробластов (FGF2) регулируют пролиферацию и функционирование эндотелиальных клеток в эмбриогенезе, ангиогенезе и других физиологических процессах. Генетическая модификация эндотелиальных клеток позволить объединить эти два подхода и увеличить регенеративный потенциал клеток за счет гиперэкспрессии ангиогенных факторов.

В этом исследовании мы трансфицировали, эндотелиальные клетки пупочной вены человека (HUVES) мультицистронными плазмидными конструкциями, кодирующими ангиогенные факторы VEGF, FGF2 и флуоресцентный белок DsRed (pVax1-VEGF-FGF2-DsRed, pVax1-VEGF-DsRed, pVax1-FGF2-DsRed, pVax1-DsRed). Культивируемые клетки обладали веретеновидной фибробластно-подобной морфологией и имели фенотип CD105⁺CD54⁺CD31⁺CD45⁻.

Гиперэкспрессия VEGF и FGF2 трансфицированными HUVES была продемонстрирована в ИФА и ПЦР-РВ. Количественный анализ растворимых факторов, показал, что нетрансфицированные HUVES секретируют во внешнюю среду интерфероны, хемокины, факторы роста и противовоспалительные цитокины. Генетическая модификация HUVES плазмидой pVax1-DsRed, кодирующей только ген DsRed, не влияла на секрецию исследованных цитокинов. Так же в ходе этого анализа была подтверждена гиперэкспрессия VEGF и FGF2 трансфицированными клетками, однако мы не обнаружили значимых изменений в секреции и продукции остальных растворимых факторов.

Таким образом, генетическая модификация данными плазмидными конструкциями обеспечивает гиперэкспрессию VEGF и FGF2, но не влияет на секрецию остальных растворимых факторов трансфицированными клетками.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

1. Lee, Y.-C. et all. // *Mol Neurobiol* **2018**, 55, 7743–7757. doi:10.1007/s12035-018-0867-5.

АНАЛИЗ АНТИГЕНПРЕЗЕНТИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТИ ДЕНДРИТНЫХ КЛЕТОК, ЗАГРУЖЕННЫХ МЕМБРАННЫМИ ВЕЗИКУЛАМИ КЛЕТОК МЕЛАНОМЫ ЧЕЛОВЕКА

А.В. Городилова, Ч.Б. Харисова, Ю.П. Маясин, И.Ю. Филин, К.В. Китаева, Д.С. Чулпанова, В.В. Соловьева, А.А. Ризванов

Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

anagorodilova@yandex.ru

Дендритные клетки (ДК) являются профессиональными антигенпрезентирующими клетками. Благодаря наличию молекул МНС-II и костимулирующих доменов на поверхности мембраны, ДК способны активировать наивные Т-клетки, что свидетельствует о потенциальной возможности использования терапевтических вакцин на основе ДК для лечения онкологических заболеваний. Мембранные везикулы — округлые структуры, окруженные цитоплазматической мембраной и содержащие на поверхности мембраны антигены, унаследованные от материнской клетки. Целью работы является оценка антигенпрезентирующей активности ДК после культивирования с индуцированными цитохалазином В мембранными везикулами (иМВ) опухолевых клеток.

Мононуклеарные клетки периферической крови (МКПК) человека выделили путем центрифугирования в градиенте плотности фиколла (1,077 г/см³). Из полученной фракции клеток выделили CD14⁺ моноциты путем адгезии к поверхности культурального планшета. Дифференцировка ДК из CD14⁺ моноцитов (моДК) проводилась в течение 7 дней путем добавления цитокинового коктейля. иМВ выделяли из клеток меланомы человека М14 при помощи цитохалазина В и добавляли к моДК для ко-культивирования в течение 24 часов, после чего свежесделанные МКПК добавляли к зрелым моДК для антигенпрезентации. Анализ поверхностных маркеров цитотоксических Т-лимфоцитов (ЦТЛ) и Т-хелперов 2 проводили при помощи проточной цитофлуориметрии методом окрашивания конъюгированными антителами.

Согласно полученным данным, активированных ЦТЛ после культивирования с моДК в 1,8 раз больше, чем в контрольной группе клеток, не прошедших антигенпрезентацию, а количество Т-хелперов 2 в 1,2 раза больше по сравнению с контрольной группой.

Ко-культивирование загруженных опухолевыми иМВ дендритных клеток и МКПК привело к увеличению популяции активированных ЦТЛ и Т-хелперов 2. Таким образом, опухолевые иМВ могут являться перспективными иммуномодулирующими агентами для активации ДК. Однако необходимы дальнейшие исследования в данной сфере для поиска возможных путей модуляции иммунного противоопухолевого ответа.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВЫХОДА ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ВЕЗИКУЛ И ВЕЗИКУЛ, ГЕНЕРИРУЕМЫХ УЛЬТРАЗВУКОМ

А.И. Дойникова, В.Ю. Сыромятникова, М.О. Гомзикова

НИЛ «Межклеточной коммуникации», КФУ, Казань, Россия

dojnikova1998@mail.ru

Внеклеточные везикулы (ВВ), продуцируемые большинством клеток, являются естественными переносчиками биологических молекул. Благодаря их способности инкапсулировать различные вещества и проникать через физиологические барьеры, они широко изучаются в качестве средств доставки лекарств. Однако внедрение ВВ в клиническую практику затруднено из-за отсутствия промышленно адаптированного способа их продукции, который будет обеспечивать получение везикул в значимом количестве, целостность, однородность и сохранение биологической активности.

Нами было проведено выделение естественных ВВ из кондиционированной среды, полученной в результате 48-часовой инкубации мышинных МСК жировой ткани в среде, обедненной экзосомами путём ультрацентрифугирования при 100000g в течение 18 ч. Естественные ВВ выделяли методом последовательного центрифугирования в режиме: 1) 150g - 10 мин; 2) 150g - 20 мин; 3) 2300g - 10 мин; 4) 10000g - 45 мин; 5) 100000g - 90 мин. Индуцированные везикулы выделяли путём обработки клеток ультразвуком: 10 млн НЕК293 ресуспендировали в 5 мл PBS и обработали ультразвуком в режиме 20kHz, амплитуда 20, цикл 5 с помощью ультразвукового гомогенизатора при 4°C. Далее образец центрифугировали при 10000 g в течение 45 мин с последующей фильтрацией супернатанта (размер пор 1 мкм).

Мы обнаружили, что количество везикул, генерируемых ультразвуком, составило 54000 частиц/клетка, в то время как выход естественных ВВ составил 55400 частиц/клетка. Таким образом, метод ультразвуковой обработки позволяет получить количество везикул, эквивалентное количеству, продуцируемому клетками за 48 ч, за короткий промежуток времени и с меньшими трудозатратами, что делает его перспективным способом массового производства везикул, стимулирующий их внедрение в качестве средств доставки лекарств в клиническую практику.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №21-75-10035. Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

ВОВЛЕЧЕННОСТЬ АТФ-ОПОСРЕДОВАННОЙ СИГНАЛИЗАЦИИ В ПАТОГЕНЕЗ РАССТРОЙСТВ АУТИСТИЧЕСКОГО СПЕКТРА

Д.В. Ефимова, А.Е. Хайруллин

Казанский государственный медицинский университет, Казань, Россия

Dina.efimova27@yandex.ru

Аутизм, или расстройства аутистического спектра (РАС), является актуальной проблемой современной клинической медицины иных сопряжённых с ней научных дисциплин. Для аутизма типична полисистемность нарушений, проявляющаяся в неврологических и сопутствующих соматических изменениях, таких как поражение кишечника, поджелудочной железы, лёгких, тазовых органов, почек и опорно-двигательного аппарата, что, в свою очередь, может приводить к негативным изменениям функций ЦНС и вызывать различные поведенческие и коммуникативные нарушения у пациентов с РАС. Выявление спектра расстройств, а также изучение механизмов их развития и взаимосвязи — актуальная проблема, решение которой может иметь большое значение для установления факторов, влияющих на развитие РАС. На данный момент существуют лишь единичные экспериментальные и клинические свидетельства того, что в проявлениях РАС могут быть задействованы пуриновые рецепторы.

Цель: оценка участия пуринорецепторов и пуринорецептор-опосредованных процессов в изменениях, происходящих в мышечных тканях крыс при моделировании РАС.

Моделирование РАС будет проводиться введением вальпроевой кислоты беременным самкам крыс с дальнейшим исследованием состояния мышечных тканей потомства на разных сроках жизни. Объект исследования: m.soleus, m.EDL и m.diafragma крыс.

Первым этапом исследования будет оценка механической активности изолированных тканей фармакологическими методами: ответов мышечных тканей на воздействие агонистов и антагонистов пуринорецепторов, а также при стимуляции тканей электрическим полем. Дальнейшие исследования будут направлены на определение активности ферментов, метаболизирующих внеклеточные пуриновые нуклеотиды, а также определение подтипов P2-рецепторов, имеющихся в исследуемых тканях животных с РАС.

Полученные данные в ходе исследования позволят установить взаимосвязь нейробиологических механизмов при развитии нервно-психических и соматических нарушений, что послужит основой для проведения комплексной терапии и реабилитации пациентов с РАС.

СОХРАНЕНИЕ РАВНОВЕСИЯ У ЧЕЛОВЕКА ПРИ ПРОСМОТРЕ ВИДЕОРЯДА В ШЛЕМЕ ВИРТУАЛЬНОЙ РЕАЛЬНОСТИ

А.Ф. Желтухина, И.Э. Шафигуллина, Л.М. Бикчентаева, М.Э. Балтин

ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия

angelina7385@yandex.ru

Использование интерактивных вычислительных систем получает широкое распространение и технологии виртуальной реальности (VR) внедряются в различные области, такие как медицина, индустрия игр и образование.

Целью исследования было оценить влияние технологий виртуальной реальности на постуральную устойчивость здоровых участников с применением метода компьютерной стабилометрии. В ходе исследования были обследованы студенты Казанского (Приволжского) Федерального Университета - 26 человек в возрасте от 20 до 24 лет. Все исследования были проведены с информированного добровольного согласия участников в соответствии с Хельсинской декларацией.

Проводились различные стабиллографические тесты: стандартный стабиллографический тест на твердой и мягкой поверхности, тест Ромберга при просмотре видеоряда на экране телевизора и с использованием шлема виртуальной реальности (HMD).

Мы показали, что как при просмотре видео на экране, так и в шлеме виртуальной реальности в сравнении с контрольными тестами (до просмотра) наблюдались изменения стабиллометрических показателей участников исследования. Однако, при просмотре участниками видеоряда с применением HMD наблюдалось более значимое смещение классических и векторных показателей постуральной устойчивости. После просмотра видеоряда в шлеме VR не наблюдалось восстановления стабиллометрических показателей, что говорит о том, что кратковременное пребывание в иммерсивной виртуальной среде даже с отсутствием динамической составляющей приводит к нарушению равновесия, хотя и кратковременному. При использовании мягкой поверхности все качественные количественные изменения равновесия были более выражены. Мы полагаем, что использование виртуальной иммерсивной среды может иметь важное значение в реабилитации, поскольку может помочь в оценке и улучшении равновесия в различных условиях, а также позволяет моделировать проблемные ситуации.

Работа выполнена в рамках программы «Стратегическое академическое лидерство Казанского федерального университета» (ПРИОРИТЕТ-2030).

АНТИМИКРОБНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ЭНДОФИТНЫХ АКТИНОБАКТЕРИЙ, ВЫДЕЛЕННЫХ ИЗ ДУШИЦЫ ОБЫКНОВЕННОЙ (*ORIGANUM VULGARE L.*)

О.В. Иванкова, Н.С. Карамова

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

lesechka.ivankova@yandex.ru

Проблема антибиотикорезистентности сейчас находится в центре внимания многих исследователей. Количество научных работ по этой теме растет в геометрической прогрессии и поиск новых потенциально активных веществ, подавляющих рост бактерий, возбудителей различных инфекций, считается как никогда актуальным.

Эндофитные актинобактерии — одна из основных групп микроорганизмов, поддерживающих симбиотические отношения с лекарственными растениями и являющаяся ключевым резервуаром биологически активных соединений.

Целью данного исследования явилась оценка антимикробных свойств эндофитных актинобактерий, выделенных из многолетнего дикорастущего травянистого растения душицы обыкновенной (*Origanum vulgare L.*) из семейства Губоцветных (*Labiatae*).

В качестве тест-микроорганизмов использовали штаммы условно-патогенных микроорганизмов: *Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli* и *Candida albicans*. Антибиотикочувствительность штаммов оценивали с применением метода агаровых блоков (диаметр 7,5 мм). Чувствительность тестерных штаммов к действию вторичных метаболитов эндофитных актинобактерий определяли по диаметру ингибирования роста (мм). Все эксперименты проводились в трех повторностях. Статистическую обработку результатов проводили в Excel 2010.

Было установлено, что наибольшую чувствительность к метаболитам эндофитных актинобактерий показывают бактерии с грамположительным морфотипом *E. faecalis*, *S. aureus* и диморфный гриб *C. albicans*: зоны ингибирования роста данных микроорганизмов составили 35.5 ± 4.1 мм, 33.3 ± 2.1 и 30.1 ± 7.2 мм соответственно. Метаболиты исследованных эндофитных актинобактерий оказывали сравнительно меньший подавляющий эффект на бактерии с грамотрицательным морфотипом: диаметры зон ингибирования роста *E.coli* и *P.aureginosa* составили 20.6 ± 6.6 и 12 ± 2.2 мм (мм).

Таким образом, дальнейшее изучение свойств экстрактов эндофитных актинобактерий, выделенных из душицы обыкновенной (*Origanum vulgare L.*), имеет перспективы в качестве потенциального источника антимикробных веществ.

РОЛЬ КТ-ПЕРФУЗИИ И МРТ В РЕЖИМАХ DWI И ADC В ВЫБОРЕ ТАКТИКИ ВЕДЕНИЯ ПАЦИЕНТОВ С ОНМК

М.В. Ивков^a, А.Ф. Юсупова^b, М.И. Черкашина^b, Е.А. Глухова^b

^a *Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия*

^b *Кафедра онкологии, лучевой диагностики и лучевой терапии КГМУ, Казань, Россия*

ivckovm@yandex.ru

Введение: На сегодняшний день государственной службой статистики РФ опубликованы данные, согласно которым острое нарушение мозгового кровообращения (ОНМК) – одна из ведущих причин смерти населения РФ, занимающая первые места в списках причин смерти и причин инвалидизации трудоспособного населения. Также, согласно данным исследования экономических аспектов лечения больных с ОНМК, средняя стоимость одного случая госпитализации пациента составляет $49201,8 \pm 13225,3$ рубля (порядка 127000 с учетом амбулаторного лечения и медико-социальную реабилитации, вторичную профилактику). Так же существует прямая корреляция между увеличением затрат на лечение и возрастом пациента, однако при этом степень инвалидизации не снижается. Своевременная диагностика ОНМК, получение полной и достоверной информации о причинах ишемии, размерах зон и их локализации играют важную роль в успешной терапии, снижении риска инвалидизации и, как следствие, стоимости лечения.

Цель исследования: оценка роли КТ-перфузии и МРТ в режимах DWI и ADC в выборе тактики ведения пациентов с ОНМК.

Материалы и методы: было проведено обследование 15 пациентов с диагнозом по МКБ-10 I63.0- I63.9. исследование проводилось при помощи компьютерного томографа «Philips Brilliance 64» и МРТ аппарата «GE signa HDxt 1,5T» результаты сравнивались с изображениями, полученными при диффузно-взвешенной МРТ (DWi) у тех же пациентов.

Результаты и обсуждения: в ходе исследования были проанализированы данные 15 пациентов, полученные за периоды 2021-2022 год, так же был проведен сравнительный анализ информативности методов КТ-перфузии и МРТ в режимах DWi и ADC, который показал, что метод ПКТ является информативным в диагностике пациентов с ОНМК, дает возможность точнее локализовать зону ишемии, установить жизнеспособность тканей и выбрать тактику лечения, позволяющую уменьшить риск инвалидизации пациента и сократить время реабилитации.

ОЦЕНКА СИНЕРГИЗМА ФАГОТЕРАПИИ С АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫМИ ПРЕПАРАТАМИ В ОТНОШЕНИИ *PSEUDOMONAS AERUGINOSA*

В.Н. Ильина^а, А.Е. Гатина^а, А.С. Горшкова^б, В.В. Дрюккер^б, А.Р. Каюмов^а

^а Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

^б Лимнологический Институт Сибирского Отделения Российской Академии Наук, Иркутск, Россия

v_nikolayevna@inbox.ru

P. aeruginosa является опасным патогеном для человека, вызывающим различные инфекции, особенно у лиц с ослабленным иммунитетом. Способность *P. aeruginosa* образовывать биопленки делает её лечение неэффективным и поэтому способствует развитию хронических инфекций, в том числе хронических легочных инфекций у людей с муковисцидозом. Поэтому разработка новых эффективных антибактериальных препаратов и альтернативных вариантов лечения является актуальной задачей современной фармацевтики. Бактериофаги, вирусы бактерий, по-видимому, являются одной из таких альтернатив. Хотя эффективность фагов в сочетании с антибактериальными препаратами показана во многих работах, высокая штаммоспецифичность бактериофагов требует поиска новых для создания фаговых коктейлей.

Целью данной работы было оценить возможность сочетания фаготерапии с антибактериальными препаратами против клеток *Pseudomonas aeruginosa*.

В работе использовали штаммы *P. aeruginosa* ATCC 27853, PAO 190158 и бактериофаг Ka2, выделенный из озера Байкал. Минимальную подавляющую концентрацию (МПК) противомикробных агентов определяли методом микроразведений в бульоне. Жизнеспособность клеток оценивали в резазуриновом тесте. Полногеномное секвенирование генома бактериофага проводили на платформе Illumina-SOLEXA (MiSeq).

Геном Ka2 состоит из 66310 нуклеотидов и имеет максимальную идентичность с геномом фага *Pseudomonas* S50 (97 % при 99 % покрытии), принадлежащего к семейству *Myoviridae*. Электронная микроскопия подтвердила соответствие структуры миовирусам. Бактериофаг Ka2 проявлял синергизм с амикацином, гентамицином, колистином и меропенемом. В сочетании с фагом минимальная подавляющая концентрация этих препаратов снижалась в несколько раз. Так, МПК амикацина на различных тест-штаммах снижалась в 4-8 раз, гентамицина - в 8 раз, колистина - в 4-8 раз, меропенема - в 4 раза.

Таким образом, данный бактериофаг может быть использован в составе коктейлей различных фагов для лечения инфекций.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности. Проект № FZSM-2022-0017.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ АПТАМЕРОВ С БИОМАРКЕРАМИ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

З.И. Исхакова^a, В.А. Карасев^b, Н.О. Ситков^b, А.А. Колобов^c, А.А. Колобов^c, Т.М. Зимина^b,
О.А. Маркелов^b, М.И. Богачев^b, Д.И. Каплун^b, А.Р. Каюмов^a

^a К(П)ФУ, Казань, Россия

^b СПбГЭТУ "ЛЭТИ", Санкт-Петербург, Россия

^c ФГУП «НИИ ГПЭЧ» ФМБА России

zalinunya@mail.ru

Важнейшей проблемой современного биомедицинского анализа является оперативная диагностика острых и хронических заболеваний, особое место среди которых занимают заболевания сердечно-сосудистой системы, которые являются основной причиной смертности населения. Решающим фактором, определяющим прогноз развития заболевания, является своевременная диагностика. Надежным средством является подтверждение диагноза с помощью биохимических методов, а именно с помощью анализа биомаркеров заболеваний в крови. Поэтому, очевидна необходимость поиска путей создания диагностических средств нового поколения, ключевую роль в которых играет поиск и создание комплементарных распознавателей, способных селективно связываться с маркерными белками.

Биомаркерами сердечно-сосудистых заболеваний, в ходе предварительных исследований в качестве модельного объекта были выбраны лактоферрин, миелопероксидаза и миоглобин. С помощью моделирования *in silico*, были получены олигопептиды, потенциально распознающие данные маркерные белки. Взаимодействия между аптамерами и биомаркерами оценивали *in vitro* с помощью микромасштабного термофореза. В результате было показано, что с миоглобином взаимодействуют 2 из 4 потенциальных пептидов под кодовым названием LETI-5 и LETI-6. Миелопероксидаза была представлена в моно- и димерной форме. Когда биомаркер находился в мономерной форме он связывал оба потенциальных пептида, однако димерная форма белка связывала лишь 1 из 2 пептидов. Потенциальный аптамер для лактоферрина не показал взаимодействия с мишенью. Также было установлено, что пептид под кодовым названием LETI-8 показывает неспецифическое взаимодействие со всеми тестируемыми белками.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 21-79-20219.

АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ТЕМОПОРФИНА С ПОЛИМЕРНЫМИ ПРОИВОДНЫМИ β -ЦИКЛОДЕКСТРИНА

И.В. Коблов^a, V. Kaskeh^b, И.Е. Кравченко^a, В.П. Зорин^b

^a *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

^b *Международный государственный экологический институт им. А.Д. Сахарова БГУ, Минск, Беларусь*

iv.kablov@gmail.com

Циклодекстрины (ЦД) представляют собой циклические олигосахариды, состоящие из определенного числа D-глюкопиранозных звеньев, связанных α -(1-4) связями. В силу особенностей химической структуры и физико-химических свойств ЦД легко образуют комплексы включения с гидрофобными молекулами. На основе ЦД было получено и исследовано большое количество гидрогелей. Показано, что они обладают большим потенциалом в ряде биомедицинских приложений. Можно предположить, что комплексы порфирина – гидрогель могут быть использованы в методе фотодинамической терапии.

Целью работы явилось спектральное исследование процессов образования комплексов порфиринового фотосенсибилизатора темпорфина (mTHPS) (Biolitec, Germany) с полимерными циклодекстринами (ЦДП): карбоксиметилловый полимер β -циклодекстрина (β -ЦДП-СООН) и полимер β -циклодекстрина (β -ЦДП).

Результаты анализа спектрально-флуоресцентных характеристик показали, что mTHPS эффективно образует комплексы как с мономерными, так и с полимерными производными β -ЦД. На основании исследования изотерм связывания проведено сравнение сродства темпорфина к полимерным и мономерным ЦД. Показано, что аффинность mTHPS к исследуемым производным β -ЦД сильно не отличается. В то же время анализ кинетики диссоциации mTHPS из комплексов свидетельствует о существенном различии в протекании этого процесса для мономерных и полимерных производных ЦД.

Полученные результаты показывают, что полимерные циклодекстрины могут служить платформой для создания новых фармакологических форм для введения порфириновых фотосенсибилизаторов при проведении фотодинамической терапии.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АНЕСТЕЗИРУЮЩЕГО ВЕЩЕСТВА ДЕКСМЕДЕТОМИДИНА ГИДРОХЛОРИДА НА КОРТИКАЛЬНУЮ И ГИППОКАМПАЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ НОВОРОЖДЕННЫХ ГРЫЗУНОВ *INVIVO*

А.Е. Логашкин, А.Р. Мамлеев, В.М. Силаева, А.В. Олейников, М.Г. Минлебаев

*ФГАОУ ВО Казанский Федеральный Университет Институт Фундаментальной Медицины и
Биологии НИЛ “Нейрофизиология”, Казань, Россия*

anatolijlogaskin@gmail.com

Введение. Современные исследования в нейробиологии часто нуждаются в использовании анестезии. Среди анестетиков наиболее широко применяется инъекционный анестетик - уретан. В последнее время его использование ограничивается из-за ряда негативных эффектов связанных с его применением. Вследствие этого появляется необходимость поиска других анестетиков, которые могли бы заменить уретан. Однако в то время как эффекты уретана на центральную нервную систему хорошо изучены [1], остается вопрос степени воздействия других анестетиков на функционирование головного мозга.

Материалы и методы. Для ответа на этот вопрос мы провели серию экспериментов, где исследовали воздействие одного из широко используемых анестетиков $\alpha 2$ -адреномиметика дексмететомидина гидрохлорида (Дексдомитор) на гиппокампальную и кортикальную активность новорожденных крысят [2,3]. Регистрировалась спонтанная активность в контроле, под действием дексмететомидина гидрохлорида и под действием уретана. В качестве свойств характеризующих изменение происходящие под действием анестезии мы использовали анализ встречаемости спонтанной гиппокампальной активности – ранних острых волн (рОВ), их амплитудно-временные характеристики, среднюю мощность кортикальной активности в альфа-бета и гамма диапазонах, а также движения животного.

Результаты. В ответ на аппликацию дексмететомидина гидрохлорида наблюдалось падение частоты встречаемости спонтанной гиппокампальной активности на 60% в сравнении с контролем, в то время как на фоне уретана падение составляло 80%. Это сопровождалось уменьшением двигательной активности соответственно в 1.5 и в 25 раз. Длина и амплитуда рОВ практически не подвергались изменениям (падение амплитуды рОВ на 25% в краевом слое наблюдалось только на введение уретана). Мощность спонтанной кортикальной активности в альфа-бета диапазоне (8-29 Гц) частот после инъекции дексмететомидина уменьшилась на 43%, а в гамма диапазоне (30-70 Гц) на 23%. На фоне уретана уменьшение мощности равнялось 94% и 80% соответственно.

Вывод. Дексмететомидин гидрохлорид показал свою эффективность как анестетик в развивающейся нервной системе. Несмотря на необходимость проведения дальнейших исследований для определения дозозависимых эффектов, уже на настоящий момент можно сделать вывод о возможном использовании дексмететомидина гидрохлорида для замены уретана.

1. Shumkova, V., Sitdikova, V., Rechapov, I., Leukhin, A., & Minlebaev, M. (2021). Effects of urethane and isoflurane on the sensory evoked response and local blood flow in the early postnatal rat somatosensory cortex. *Scientific Reports*, 11(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-021-88461-8>
2. Leinekugel X, Khazipov R, Cannon R, Hirase H, Ben Ari Y, Buzsaki G. 2002. Correlated bursts of activity in the neonatal hippocampus in vivo. *Science*. 296:2049–2052 <https://doi.org/10.1126/science.1071111>
3. Mohs EJ, Blumberg MS. 2008. Synchronous bursts of neuronal activity in the developing hippocampus: modulation by active sleep and association with emerging gamma and theta rhythms. *J Neurosci*. 28:10134–10144. <https://doi.org/10.1523/JNEUROSCI.1967-08.2008>

АНТИМИКРОБНОЕ ДЕЙСТВИЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ В ОТНОШЕНИИ ГРАМПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ БАКТЕРИЙ

А.П. Любина, Н.В. Терехова, А.Д. Волошина, Д.А. Татаринов, В.Ф. Миронов

Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия

aplyubina@gmail.com

Появление штаммов микроорганизмов, устойчивых к антимикробным препаратам, приводит к снижению эффективности и повышению стоимости лечения инфекционных заболеваний, а также увеличивает риск летального исхода. Формирование биопленок также осложняет течение болезни. Бактерии в биопленках более устойчивы к воздействию окружающей среды, в том числе к антибиотикам. В настоящее время проблема подавления образования биопленок остается актуальной.

В данной работе были исследованы фосфониевые соли, ранее показавшие высокую антимикробную активность в отношении грамположительных бактерий, в том числе метициллин-резистентных штаммов *S. aureus* [1,2,3]. В результате длительного культивирования в присутствии соединений не было отмечено выработки устойчивости у бактерий. Эксперимент с использованием флуоресцентного красителя йодида пропидия продемонстрировал воздействие фосфониевых солей на проницаемость цитоплазматической мембраны, что также подтверждается изображениями, полученными методом трансмиссионной электронной микроскопии (ТЭМ). Негативное влияние на формирование биопленок было показано для соединений-лидеров в концентрациях, близких к минимальной ингибирующей концентрации (МИК).

Таким образом, исследованные фосфониевые соли представляют интерес как потенциальные антимикробные агенты.

1. Terekhova, N. V., Lyubina, A. P., Voloshina, A. D., Sapunova, A. S., Khayarov, K. R., Islamov, D. R., Usachev K.S., Evtugyn V.G., Tatarinov D.A., Mironov, V. F.. *Bioorganic Chemistry*, **2022**, 127, 106030.
2. Terekhova, N. V., Tatarinov, D. A., Shaihutdinova, Z. M., Pashirova, T. N., Lyubina, A. P., Voloshina, A. D., Sapunova A.S., Zakharova L.Ya., Mironov, V. F.. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, **2020**, 30, 127234.
3. Tatarinov D.A., Kuznetsov D.M., Voloshina A.D., Lyubina A.P., Strobykina A.S., Mukhitova F.K., Polyancev F.M., Mironov V.F.. *Tetrahedron*, **2016**, 72, 8493–8501.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕТЕРОГЕННОГО БИОКАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ ФИЦИНА, ИММОБИЛИЗОВАННОГО В ГЕЛЬ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Н.В. Малыхина, С.С. Гончарова, М.С. Лавлинская, А.В. Сорокин, М.Г. Холявка, В.Г. Артюхов

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

natasha.malykhina2016@yandex.ru

Фицин (КФ 3.4.22.3) – сульфгидрильный протеолитический фермент, обладающий антибактериальной и противовоспалительной активностью. Благодаря своей высокой стабильности и способности к гидролизу многих видов белков, фицин широко используется в различных отраслях, таких как пищевая промышленность и медицина [1].

Карбоксиметилцеллюлоза – это производное целлюлозы, она хорошо растворима, устойчива к воздействию внешних физических факторов, способна оказывать на молекулы белков связывающий и стабилизирующий эффекты [2].

Нативные энзимы сильно подвержены изменяющимся условиям среды, поэтому для практического применения целесообразно их иммобилизовать. Иммобилизация фермента улучшает его устойчивость к ингибиторам различной природы, в ряде случаев повышается чистота энзима [3].

Целью нашего исследования была разработка методики получения гетерогенного биокатализатора на основе фицина, иммобилизованного в гель карбоксиметилцеллюлозы.

В качестве объекта исследования был выбран фицин (Sigma), субстратом для гидролиза служил азоказеин фирмы (Sigma). В качестве носителя для иммобилизации применяли карбоксиметилцеллюлозу фирмы (Sigma). Определение протеазной активности фицина проводили на субстрате азоказеине [4]. Содержание белка в иммобилизованных препаратах фицина определяли модифицированным методом Лоури [5].

Были подобраны условия иммобилизации фицина путем его включения в гель карбоксиметилцеллюлозы. Оптимальное соотношение содержания белка (28 ± 3 мг на г носителя), общей активности (61 ± 3 в ед на мл раствора) и удельной активности (220 ± 14 в ед на мг белка) получено при иммобилизации фицина путем включения в гель карбоксиметилцеллюлозы при использовании 0.05 М боратного буфера с добавлением 0.1 М КСl с рН 9.0.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 21-74-20053).

1. Столяр И.А., Григорян Д.В., Никогосян А.Р. *Папаин и другие сульфгидрильные протеолитические ферменты. Ж. Новая наука: история становления, современное состояние, перспективы развития*, 2020, 275-277.
2. Holyavka M., Faizullin D., Koroleva V., et al. *Novel biotechnological formulations of cysteine proteases, immobilized on chitosan. Structure, stability and activity. Int. J. Biol. Macromol.*, 2021, 180, 161-176.
3. Siar E.-H., Arana-Peña S., Barbosa O., et al. *Immobilization/Stabilization of Ficin Extract on Glutaraldehyde-Activated Agarose Beads. Variables That Control the Final Stability and Activity in Protein Hydrolyses. Catalysts*, 2018, 8, 8.
4. Sabirova A.R., Rudakova N.L., Balaban N.P. et al. *A novel secreted metzincin metalloproteinase from Bacillus intermedius. FEBS Lett*, 2010, 84 (21), 4419-4425.
5. Lowry O.H., Rosebrough N.J., Faar A.L. et al. *Protein measurement with folin-phenol reagent. The Journal of Biological Chemistry*, 1951, 265-275.

ЛЕКАРСТВЕННОЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ И ОЦЕНКА НАЛИЧИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ В ВОДНЫХ ОБЪЕКТАХ Г. КАЗАНИ

О.А. Махмудова^а, В.Н. Хазиахметова^а, Д.В. Брусницын^б, А.Н. Рамазанова^б

^а *Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань, Россия*

^б *Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*

odina_24@mail.ru

Актуальность. Лекарственные препараты являются неотъемлемой составляющей лечения пациента. Их применение обеспечивает сохранение здоровья населения и, как следствие, приводит к повышению качества и продолжительности жизни. Назначение и использование лекарственных средств во всем мире растет, в связи с чем растет и количество выбросов их в окружающую среду. Распространение лекарственного загрязнения в водных объектах, негативное воздействие на морскую фауну и, наконец, возможность попадания лекарственных средств в питьевую воду позволяют считать водное загрязнение ЛС наиболее опасным. Все это объясняет особое внимание к проблеме лекарственного загрязнения водных объектов г. Казани.

Материалы и методы. Исследованы пробы различных поверхностных вод (реки Волга, Казанка, озеро Кабан на территории г. Казани) с помощью амперометрических иммуносенсоров на основе электродов, модифицированных композитными материалами. В отличие от хроматографических методов, обладающими рядом недостатков, в том числе и длительной пробоподготовкой, иммуносенсоры в свою очередь обладают экспрессностью, высокой чувствительностью, селективностью, практически не требующие пробоподготовки и являющиеся мобильными. Проведено количественное определение наличия в поверхностных водах лекарственных препаратов таких как: трициклические антидепрессанты (амитриптилин, имипрамин, дезипрамин) и диклофенак – представляющий группу нестероидных противовоспалительных средств. Содержание трициклических антидепрессантов составило $2 \cdot 10^{-9}$ моль/л, диклофенака на уровне $0.7 \cdot 10^{-9}$ моль/л, что требует дальнейшего изучения экологической значимости такого загрязнения. Правильность полученных результатов подтверждена сопоставлением амперометрического иммуносенсора с поляризационным флуоресцентным иммуноанализом.

Заключение. Полученные результаты позволяют сделать выводы о необходимости: дальнейшего изучения наличия ЛС в водных объектах г. Казани и совершенствования механизмов сбора и утилизации лекарственных препаратов.

1. Dos Santos, Carolina Rodrigues et al. "Aquatic concentration and risk assessment of pharmaceutically active compounds in the environment." Environmental pollution (Barking, Essex: 1987) vol. 290 (2021): 118049. doi:10.1016/j.envpol.2021.118049

ЦИТОТОКСИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КЛЕТОК МЕЛАНОМЫ ЧЕЛОВЕКА ПОСЛЕ КО-КУЛЬТИВИРОВАНИЯ С ИММУННЫМИ КЛЕТКАМИ *IN VITRO*

Ю.П. Маясин, А.В. Городилова, Ч.Б. Харисова, И.Ю. Филин, К.В. Китаева, Д.С. Чулпанова,
В.В. Соловьева, А.А. Ризванов

Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

mayasin_yutiy@mail.ru

Дендритные клетки (ДК) – профессиональные антигенпрезентирующие клетки, которые могут стимулировать созревание и направлять антиген-специфическое действие эффекторных клеток иммунной системы на элиминацию патогена. Данные свойства ДК свидетельствуют о возможности их применения в иммунотерапии рака. В качестве опухоль-ассоциированного антигена (ОАА) было принято решение использовать индуцированные цитохалазином В мембранные везикулы (иМВ). иМВ, выделенные из опухолевых клеток, могут применяться в иммунотерапии рака благодаря наличию на поверхности их мембраны различных ОАА родительских клеток и упрощенной интернализации дендритными клетками. Целью данной работы было оценить способность ДК моноцитарного происхождения (моДК) активировать мононуклеарные клетки периферической крови (МКПК) и индуцировать апоптоз клеток меланомы человека *in vitro*.

МКПК человека выделили путем центрифугирования в градиенте плотности фиколла (1,077 г/см³). Дифференцировка моДК производилась из CD14⁺ моноцитов, полученных из МКПК, при помощи цитокинового коктейля в течение недели. Затем моДК нагружали при помощи иМВ из клеток меланомы человека М14 в течение 24 часов. После чего свежевыделенные МКПК добавляли к моДК для проведения последующей антигенпрезентации и их активации. На следующем этапе активированные МКПК добавляли к опухолевым клеткам М14 для ко-культивирования в течение 24 часов. Для сравнения цитотоксического эффекта к клеткам М14 также добавляли нативные МКПК, не прошедшие антигенпрезентацию. В качестве контроля использовали нативные М14. Для оценки индукции апоптоза опухолевые клетки окрашивали флюорисцентно-меченным белком аннексином V и йодидом пропидия, после чего анализировали с помощью проточного цитометра FACSAria III.

В результате было показано, что при добавлении нативных МКПК к М14, количество жизнеспособных опухолевых клеток снижалось на 3% относительно контрольных М14. Однако при добавлении активированных МКПК к М14, снижение жизнеспособных клеток составило 18%. Полученные результаты говорят об эффекторном действии активированных МКПК после проведенной дендритными клетками антигенпрезентации, а также об их способности индуцировать апоптоз клеток меланомы человека *in vitro* (в сравнении с контрольными образцами).

Таким образом, было показано туморицидное действие ДК-активированных МКПК и потенциальная возможность их применения в иммунотерапии рака. Однако необходимы дальнейшие исследования в этой сфере для увеличения эффективности противоопухолевого ответа.

РОЛЬ ЦИФРОВОГО КОНТЕНТА ПРИ ИЗУЧЕНИИ КОЛЛОИДНОЙ ХИМИИ В ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ПОДГОТОВКЕ БУДУЩЕГО УЧИТЕЛЯ

В.А. Миннахметова, К.А. Гордеева

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

vika.vikto96@mail.ru

В настоящей работе рассмотрена роль цифрового контента в профессиональной подготовке будущих учителей химии на основе системного подхода. Данный подход позволяет сконцентрироваться на обучении студентов – будущих учителей химии в контексте их будущей профессиональной подготовки; помогает облегчить понимание сути основных понятий, повысить мотивацию к изучению курса коллоидной химии. Анализ научной литературы по исследуемой проблеме позволил сделать следующий вывод о том, что понятие «цифровой контент» вариативно, но фундаментально подразумевает под собой построение образовательного процесса с применением инновационных цифровых средств обучения, под которыми понимается: использование дистанционных форм обучения и интернет-источники; современные визуальные средства по химии; виртуальные химические лаборатории; цифровой контент. Рассмотренные варианты применения цифрового контента в системе подготовки будущих учителей химии на примере дисциплины «Избранные главы коллоидной химии» позволили создать серию самостоятельного цифрового контента по таким темам как: «Получение золя гидроксида железа посредством гидролиза», «Определение порога коагуляции» и «Получение пены». Соответственно, каждый цифровой образовательный контент, как указано в [1], «включает отбор содержания, оптимизацию методик выполнения опытов, непосредственно съемку и монтаж цифровых методических видеоматериалов» [1]. Несомненно, создание учебного цифрового видеоконтента – это сложный и многоуровневый процесс, который требует от студента не только предметных знаний при отборе и постановке химического эксперимента, но и знаний в области видеомонтажа, операторской работы, режиссуры, компьютерной анимации. Стоит отметить, что эти знания должны отвечать принятым стандартам, относящиеся к цифровому видеоконтенту такие как: доступность, наглядность, научность. Полученные результаты исследования помогают скорректировать работу по профессиональной подготовке будущего учителя химии и повысить мотивацию студентов к изучению курса «Избранные главы коллоидной химии».

1. Гильманшина С.И., Рахманова А.Р., Миннахметова В.А. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. С. 151-155.

ВНУТРИКЛЕТОЧНАЯ МЕТАЛЛОПРОТЕИНАЗА *K. OXYTOCA*

П.С. Мишеева, А.М. Марданова

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

p.misheeva@yandex.ru

Известно, что вирулентность бактерий видов *Klebsiella pneumoniae* и *Klebsiella oxytoca* может быть связана с формированием биопленок, продукцией протеолитических ферментов и инвазией бактерий в клетки уротелия [1]. Ранее в клетках *Serratia grimesii* была обнаружена металлопротеиназа гримелизин, расщепляющая актин в единственном сайте с образованием двух фрагментов размером 36 и 8 кДа. Предположительно, продукция гримелизина способствует инвазии бактерий в клетки эукариот [2]. С помощью программы BLAST, а также онлайн-ресурсов NCBI и ASAP в геномах разных штаммов *K. oxytoca* нами был обнаружен ген размером 1029 п.о., гомологичный гену гримелизина *S. grimesii*. Гомология продуктов этих генов составила 71%. Целью настоящей работы была инактивация гена гипотетической металлопротеиназы уропатогенного штамма *K. oxytoca* НК-1.

Исследовали способность клеточного экстракта штамма *K. oxytoca* НК-1 к ограниченному протеолизу скелетно-мышечного актина с образованием стабильного фрагмента массой 36 кДа. Активность гримелизиноподобной протеиназы детектировали с помощью электрофореза в 12.5% ПААГ-SDS по методу Лаэмли. Максимальное накопление специфической внутриклеточной протеиназы наблюдали на 48 ч роста при температуре культивирования 37°C. Снижение температуры до 30°C ингибировало накопление гримелизиноподобной протеиназы.

Ген гипотетической металлопротеиназы инактивировали с помощью метода Даценко с модификациями. С помощью ПЦР-амплификации получили вставку размером 1500 п.н., содержащую ген устойчивости к канамицину, а также участки гомологичные к концам гена металлопротеиназы. Были получены рекомбинантные клетки НК-1, несущие плазмиду-помощник рKD46:GcR с генами λ Red-рекомбиназ. Далее с помощью электропорации компетентные клетки *K. oxytoca*, накопившие оптимальное количество рекомбиназы, были трансформированы ПЦР-амплификатом и трансформанты были отобраны на среде с канамицином. Колонии рекомбинантов с инактивированным геном металлопротеиназы были детектированы с помощью ПЦР и электрофореза в агарозном геле на наличие специфического продукта размером 1500 п.н.

Таким образом, в геноме *K. oxytoca* НК-1 идентифицировали ген гримелизиноподобной протеиназы, а в клеточном экстракте – специфическую актинолитическую активность. С помощью λ Red-опосредованной рекомбинации получили мутант *K. oxytoca* НК-1 с инактивированным геном гипотетической металлопротеиназы.

1. C. Delcaru *et al.* Pathogens, 2017, **6**(2), 22.
2. С. Ю. Хайтлина. Цитология, 2009, **51**, 182-189.

АНАЛИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОСТИ И БИОРАСПРЕДЕЛЕНИЯ В НЕРВНОЙ СИСТЕМЕ СВИНЕЙ АДЕНОАССОЦИИРОВАННОГО ВИРУСА СЕРОТИПА Olig001, КОДИРУЮЩЕГО КДНК ГЕНА АРИЛСУЛЬФАТАЗЫ А

А.И. Муллагулова, А.А. Шаймарданова, В.В. Соловьева, Я.О. Мухамедшина, А.А. Костенников, А.А. Ризванов

ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия

aisilu.mullagulova@yandex.ru

Метахроматическая лейкодистрофия (МЛД) – аутосомно-рецессивное наследственное нейродегенеративное заболевание, характеризующееся поражением миелиновой оболочки, покрывающей большинство нервных волокон центральной (ЦНС) и периферической нервной системы (ПНС). МЛД возникает вследствие мутации в гене *ARSA*. Цель исследования проанализировать эффективность и функциональность аденоассоциированного вируса серотипа Olig001, кодирующего ген *ARSA* человека (AABOlig001-coARSA), при интратекальном введении мини-свиньям.

В этом исследовании был создан AABOlig001-ARSA, который содержит уникальную кодон-оптимизированную нуклеотидную последовательность гена *ARSA*. Полученный AABOlig001-ARSA вводили интратекально ($1,45 \times 10^{12}$ геномных копий/кг) двум мини-свиньям. Результаты сравнивали с группой интактных животных. Органы центральной нервной системы (ЦНС) использовали для анализа экспрессии *ARSA* с использованием кПЦР и иммуногистохимии (ИГХ). Ферментативную активность *ARSA* в лизатах клеток, плазме, СМЖ в гомогенате органов ЦНС животных анализировали с помощью рNCS (#N7251, SIGMA). ИГХ проводили с использованием моноклональных антител к *ARSA* (#MAG619HU21, Cloud-Clone Corp).

Обнаружено повышение активности *ARSA* в плазме и СМЖ на 14-28 сутки. С помощью кПЦР подтвердили наличие мРНК *ARSA* в ЦНС. ИГХ анализ показал экспрессию белка *ARSA* в ЦНС. Таким образом, мы показали, что после интратекального введения AABOlig001-ARSA достигает ЦНС и приводит к сверхэкспрессии *ARSA*.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030) и за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания №0671-2020-0058 в сфере научной деятельности.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И СОСТАВА СРЕДЫ НА СПОСОБНОСТЬ ФОРМИРОВАТЬ БИОПЛЕНКИ ШТАММАМИ *MORGANELLA MORGANII*

Г.И. Мухтарова, Л.Ф. Миннуллина, А.М. Марданова

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

guzel.haliullova@mail.ru

Бактерия *Morganella morganii* присутствует в нормальной микрофлоре кишечника человека. Тем не менее, она также способна вызывать ряд тяжелых заболеваний, в частности, инфекции мочевыводящих путей (ИМП) [1]. Известно, что формирование микробных биопленок усугубляет протекание ИМП и увеличивает длительность лечения [2].

Целью данной работы стало установление особенностей формирования биопленок штаммами *M. morganii* в зависимости от состава среды и температуры культивирования.

В работе использовались урологические изоляты *M. morganii* MM 1 и MM 190. Способность к образованию биопленок оценивали по эффективности связывания 0.1% генцианового фиолетового бактериями, адгезированными к поверхности полистирола. Для этого штаммы культивировали 48 ч в стационарных условиях на средах LB и Мюллера-Хинтона при температурах 30 °C и 37 °C.

Ранее было показано, что штамм MM 1, в отличие от MM 190, сохранял способность к плавающей подвижности при температуре 37 °C. В ходе данного исследования было обнаружено, что штаммы MM 1 и MM 190 способны образовывать биопленки. Причем, оба штамма образовывали биопленки лучше на среде LB. При культивировании на среде Мюллера-Хинтона способность к формированию биопленок понижалась примерно на 40%. Штамм MM 190 при культивировании при 30 °C формировал биопленки на 30% эффективнее штамма MM 1, а при 37 °C – на 72% эффективнее.

Таким образом, мы показали, что урологические изоляты *M. morganii* в разной степени способны формировать биопленки. Известно, что большинство энтеробактерий теряют способность к жгутиковой подвижности при температуре организма хозяина, но при этом увеличивают экспрессию фимбриальных генов, что, к примеру, приводит к успешной колонизации мочевыводящих путей [3]. Увеличение формирования биопленок штаммом MM 190 при 37 °C может быть связано с данным явлением. Кроме того, показано, что штаммы лучше формируют биопленки на среде LB, чем на среде Мюллера-Хинтона, что, вероятно, связано с особенностями химического состава сред.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.

1. Murray, BO. Recurrent Urinary Tract Infection: A Mystery in Search of Better Model Systems. [Text] / BO. Murray, C. Flores, C. Williams, DA. Flusberg, EE. Marr, KM. Kwiatkowska, Charest JL. // Cell Infect Microbiol. – 2021. – V.26. – P. 691-710.
2. Shi, H. *Morganella morganii*: An unusual analysis of 11 cases of pediatric urinary tract infections [Text] / H. Shi, X. Chen, Y. Yao, J. Xu. // Lab Anal. – 2022. – V.29. – P. 243-259.
3. White-Ziegler, CA. Human body temperature (37degrees C) increases the expression of iron, carbohydrate, and amino acid utilization genes in Escherichia coli K-12. [Text] / CA. White-Ziegler, AJ. Malhowski, S. Young. J Bacteriol. – 2007. – V.189, No.15. – P.5429-5440.

ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ НА ИНКАПСУЛЯЦИЮ ИНДОМЕТАЦИНА И РИТОНАВИРА

В.Ю. Осельская, А.К. Гатиатулин, М.А. Зиганшин, В.В. Горбачук

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

victorose@mail.ru

Биосовместимость и способность циклодекстринов (ЦД) к инкапсуляции биологически активных веществ делают их привлекательными для разработки новых функциональных материалов. Одной из сфер применения соединений включения циклодекстринов является фармацевтическая промышленность. Инкапсуляция лекарственных веществ циклодекстринами способна улучшить их свойства: повысить растворимость, биодоступность и стабильность лекарственного средства, увеличить срок годности фармацевтических составов.

В настоящей работе методами ТГ/ДСК/МС, порошковой рентгеновской дифрактометрии и ИК-спектроскопии изучалось влияние гидратации на способность α -, β - и γ -ЦД образовывать соединения включения с твердыми лекарственными веществами – индометацином и ритонавиром. Разработан способ оценки степени включения ритонавира циклодекстринами по данным ДСК. В результате показано, что в зависимости от уровня гидратации γ -ЦД вода может играть конкурирующую роль при связывании лекарственных веществ индометацина и ритонавира. Полная гидратация этого циклодекстрина приводит к понижению степени связывания индометацина и ритонавира в условиях совместного механического диспергирования. Для индометацина аналогичный результат наблюдается также при связывании насыщенным гидратом β -ЦД. Меньшее содержание воды в насыщенном гидрате α -ЦД и промежуточном гексагидрате γ -ЦД является недостаточным для конкуренции с индометацином и ритонавиром, в результате наблюдается их полное связывание при перетирании с этими гидратами. При приготовлении соединений включения индометацина и ритонавира с безводными α -, β - и γ -ЦД также наблюдается полное связывание этих лекарственных веществ.

Таким образом, полученные результаты показывают, что избыточное количество воды при приготовлении лекарственных препаратов в виде соединений включения активных фармацевтических ингредиентов с β - и γ -циклодекстринами может уменьшать выход продукта. Полученные результаты могут быть полезными при разработке технологических процессов инкапсуляции лекарственных веществ циклодекстринами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 20-33-90130 и по госзаданию Министерства науки и высшего образования № 0671-2020-0061.

ИММОБИЛИЗАЦИЯ ФИЦИНА НА МАТРИЦЕ ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА

Д.С. Пайметьева, А.Н. Дубовицкая, М.Г. Холявка, М.С. Лавлинская,
А.В. Сорокин, В. Г. Артюхов

Медико-биологический факультет ВГУ, Воронеж, Россия

pay.dar@yandex.ru

Ценность использования ферментов в качестве биокатализаторов в промышленности заключается в их исключительной специфичности. Высокий спрос на биокатализаторы вызвал рост числа прикладных исследований в области иммобилизации ферментов. Оптимизация протоколов иммобилизации в каждом конкретном случае позволяет повышать стабильность фермента, его активность, специфичность и селективность [1]. Фицин – это растительный протеолитический фермент. Он находит широкое применение в фармацевтической промышленности, может выступать в роли антигельминтного лекарственного препарата, участвует в заживлении ран млекопитающих, иммуномодуляции, применяется при заболеваниях пищеварительной системы [2].

В нашей работе мы использовали в качестве матрицы для иммобилизации фицина поливинилпирролидон (ПВП), обладающий доступностью, механической прочностью, высокой биосовместимостью. Образцы готовили с добавлением резорцина и без него. После проведения инкубации измеряли активность фермента спектрофотометрически по образованию окрашенного продукта реакции фермента с *N*- α -бензоил-*DL*-аргинин-*n*-нитроанилидом (4-нитроанилина). Активность фицина, иммобилизованного на матрице ПВП в отсутствие резорцина, составила 9% от каталитической способности нативного фермента, а активность фермента, иммобилизованного на матрице ПВП с добавлением резорцина, составила 16% от значения исходной активности свободного фермента. Таким образом, мы предлагаем использовать поливинилпирролидон в качестве матрицы для иммобилизации фицина в присутствии резорцина.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2020-2022 годы, проект № FZGU-2020-0044

1. С. Mateo et al. Improvement of enzyme activity, stability and selectivity via immobilization techniques. *Enzyme and microbial technology*, 2007, V. 40, №. 6, P. 1451-1463.
2. С. Е. Salas et al. Plant cysteine proteinases: evaluation of the pharmacological activity. *Phytochemistry*, 2008, V. 69, №. 12, P. 2263-2269.

ГЕЛИ ХИТОЗАНА И СУКЦИНАТА ХИТОЗАНА КАК ФОТОПРОТЕКТОРЫ ДЛЯ ТРИПСИНА ИЗ *BOS TAURUS* И КОЛЛАГЕНАЗЫ ИЗ *CLOSTRIDIUM HISTOLYTICUM*

С.М. Панкова^{a,b}, М.Г. Холявка^a, В.Г. Артюхов^a

^a Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

^b Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко, Воронеж, Россия

sazykina.93@mail.ru

В современной биотехнологии для создания препаратов без химической модификации с высоким уровнем каталитической активности используются методы физической иммобилизации, а именно включение в гели полимеров. Данный способ позволяет получить препарат, устойчивый к различным денатурирующим факторам, например, к действию УФ-света. В качестве носителя можно использовать гели пищевого хитозана и сукцината хитозана. Хитозан – природный полисахарид, состоящий из случайно распределенных β -(1→4)-связанных *D*-глюкозамина (деацетилированной единицы) и *N*-ацетил-*D*-глюкозамина (ацетилированной единицы). Трипсин (КФ 3.4.21.4) — фермент, расщепляющий пептиды и белки, в медицине трипсин применяют для лечения ран, ожогов, тромбозов. Коллагеназа (КФ 3.4.4.19), выделенная из бактерии *Clostridium histolyticum* – высокоспецифичный фермент, катализирующий гидролитическое расщепление молекул коллагена, широко применяется в медицине для лечения пациентов с контрактурой Дюпюитрена.

Целью нашей работы явилось изучение особенностей воздействия УФ-излучения на процессы фотомодуляции свободных и включенных в гели пищевого хитозана и сукцината хитозана молекул трипсина из *Bos taurus* и коллагеназы из *Clostridium histolyticum*.

В качестве объекта исследования были выбраны трипсин быка фирмы “MP biomedical”, коллагеназа из *Clostridium histolyticum* фирмы “Sigma-Aldrich”, субстратом для гидролиза служил бычий сывороточный альбумин (БСА) фирмы “Sigma-Aldrich”, носителями для иммобилизации – хитозан (<100 кДа) и сукцинат хитозана фирмы ЗАО «Биопрогресс». Иммобилизацию энзимов осуществляли методом включения в гель. Определение количества белка в препаратах и каталитической активности ферментов проводили модифицированным методом Лоури. Облучение образцов биокатализаторов осуществляли по методике, разработанной на кафедре биофизики и биотехнологии ВГУ, дозы облучения составили 151, 453, 755, 1510, 3020, 4530 и 6040 Дж/м².

Установлено, что иммобилизованные трипсин и коллагеназа проявляют более высокую устойчивость к действию УФ-излучения по сравнению со свободными формами ферментов, следовательно, мы можем констатировать, что матрицы хитозана и сукцината хитозана оказывают фотопротекторный эффект на молекулы названных протеаз.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАМОРОЗКИ НА МОНОСЛОЙНУЮ КУЛЬТУРУ И МОДЕЛЬ ОПУХОЛЕВОГО СФЕРОИДА *IN VITRO*

А.С. Пономарев, А.В. Курненкова, З.Е. Гилязиева, В.В. Соловьева

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

l.ponomarev2013@gmail.com

Опухолевые сфероиды являются перспективной моделью для исследований в области онкологии и тестирования противоопухолевых препаратов. Сфероиды имеют как недостатки, так и преимущества. К первым можно отнести более сложные условия культивирования и обработку результатов исследований. Преимущества сфероидов заключаются в их природе, а именно в неоднородности зон и градиента концентраций метаболитов и нутриентов. Сфероиды, как и монослойные клеточные культуры необходимо криоконсервировать для их длительного хранения. Однако, после заморозки не всегда удается сохранить сфероиды в первоначальном виде, а важным фактором качественной модели является сохранение свойств и повторяемость результатов при использовании. Целью данной работы является охарактеризовать способность сфероидов после заморозки отвечать на терапию цисплатином и сравнить их со сфероидами не подвергшимся заморозке и монослойным культурам.

В этом исследовании использовалась клеточная линия рака молочной железы (MCF7). Сфероиды выращивали суспензионным методом, замораживали на 30 дней и после разморозки добавляли цисплатин в концентрации 10 мкг/мл. У полученных групп сравнивали количество сфероидов, оценивали сферообразование, жизнеспособность и экспрессию генов *SOX2*, *OCT4*, *CASP8*, *BAX* методом ПЦР-РВ, также проводили окрашивание мембранным и ядерным красителями.

После разморозки количество сфероидов в опытных образцах снижалось. Это можно объяснить механическими манипуляциями во время заморозки и разрушению межклеточных контактов при низких температурах. Интересным является значительное снижение (58%) жизнеспособных клеток в сфероидах после добавления цисплатина по сравнению с клетками, которые культивировались в монослойной культуре. Также, при сравнении монослойной культуры после заморозки клеток и цисплатина относительно незамороженных клеток и цисплатина, жизнеспособность клеток снижалась на 48%. В группе сфероидов как замороженные, так и незамороженные образцы реагировали на препарат снижением количества жизнеспособных клеток на 61% и 73% соответственно. С помощью конфокальной микроскопии были визуализированы ядерный и мембранные компоненты сфероида. С использованием ПЦР-РВ было показано, что монослойные культуры и сфероиды демонстрировали схожую тенденцию снижения экспрессии мРНК генов *SOX2* и *CAS8* при добавлении цисплатина и без него. Экспрессия мРНК гена *OCT4* снижалась в группах без добавления препарата и повышалась при добавлении. Корреляции в изменениях экспрессии *BAX* не наблюдалось. Взаимосвязи в изменении экспрессии мРНК генов в зависимости от заморозки также не наблюдалось.

Таким образом, показано возможное влияние заморозки на опухолевые сфероиды. Необходимы дальнейшие исследования эффектов этого процесса.

Данное исследование выполнено в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030) и финансируется за счет гранта Российского научного фонда 21-74-10021.

БИОКАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ ПАПАИНА С МИКРО- И НАНОЧАСТИЦАМИ ХИТОЗАНА

Ю.А. Редько, С.С. Гончарова, А.В. Сорокин, М.С. Лавлинская, М.Г. Холявка, В.Г. Артюхов

ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

redkoju@yandex.ru

Папаин (КФ 3.4.22.2) – протеолитический фермент растительного происхождения, получаемый из листьев и плодов растения папайи (*Carica papaya*). Энзим используется в качестве противовоспалительного, антиоксидантного, антибактериального и ранозаживляющего вещества [1].

Полимерные нано- и микрочастицы широко применяются для создания инновационных форм лекарственных средств, способных адресно доставлять и контролируемо высвобождать во времени биологически активные вещества. К наиболее перспективным полимерам относится хитозан. Хитозан – полиаминосахарид, обладающий биосовместимостью, биodeградируемостью, высокой биологической активностью, а также иммуностимулирующими свойствами [2].

Целью нашего исследования было создание биокатализаторов на основе комплексов папаина с микро- и наночастицами хитозана.

Папаин (Sigma) был выбран в качестве объекта исследования. Микро- и наночастицы получали из кислоторастворимого среднемoleкулярного (СМ, 200 кДа) и высокомолекулярного (ВМ, 350 кДа) хитозанов, синтезированных ЗАО «Биопрогресс». Определение протеазной активности папаина проводили на субстрате азоказеине (Sigma) [3].

Активность комплексов папаина с наночастицами среднемoleкулярного хитозана оказалась выше по сравнению с комплексами микрочастиц среднемoleкулярного хитозана на 2 %, а при создании комплексов с наночастицами высокомолекулярного хитозана снизилась на 2 % относительно комплекса папаина с микрочастицами высокомолекулярного хитозана. При получении частиц в присутствии аскорбиновой кислоты активность комплексов папаина с наночастицами среднемoleкулярного хитозана была ниже на 16 % и выше на 5 % с наночастицами высокомолекулярного хитозана по сравнению с микрочастицами средне- и высокомолекулярного хитозанов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2020-2022 годы, проект № FZGU-2020-0044

1. S.S. Ol'shannikova, Y.A. Red'ko, M.S. Lavlinskaya, A.V. Sorokin, M.G. Holyavka, V.G. Artyukhov. *Preparation of papain complexes with chitosan microparticles and evaluation of their stability using the enzyme activity level. Pharmaceutical Chemistry Journal*, 2021, 55(11), 1240-1244.
2. Ю.А. Редько, С.С. Олшанникова, М.Г. Холявка, М.С. Лавлинская, А.В. Сорокин, В.Г. Артюхов. *Разработка методики получения ассоциатов бромелина с микро- и наночастицами хитозана. Химико-фармацевтический журнал*, 2022, 56 (7), 45-49.
3. A.R. Sabirova, N.L. Rudakova, N.P. Balaban et al. *A novel secreted metzincin metalloproteinase from Bacillus intermedius. FEBS Lett*, 2010, 584 (21), 4419-4425.

ФИБРИНОЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСА ВНЕКЛЕТОЧНЫХ ПРОТЕАЗ МИКРОМИЦЕТА *SAROCLADIUM STRICTUM* 203

С.Н. Ризатдинова, Е.И. Корниенко, А.А. Осмоловский

ФГБОУ ВО «МГУ имени М.В. Ломоносова», Москва, Россия

Sophia_Rizatdinova@mail.ru

Заболевания сердечно-сосудистой системы занимают первое место среди причин высокой смертности населения Земли [1]. Патогенез многих из них сопровождается избыточным тромбообразованием. Фибринолиз предотвращает закупорку сосудов и способствует своевременному элиминированию тромба [2], поэтому внеклеточные протеиназы микробиологического происхождения, отличающиеся высокой чувствительностью к компонентам тромба и эффективно расщепляющие его структуру, потенциально могут стать частью фармакотерапии пациентов с высоким риском развития подобных состояний.

Цель работы заключалась в выделении и изучении свойств протеиназ микромицета *Sarocladium strictum* 203, предположительно обладающих прямой (плазминоподобной) и непрямой (активирующей плазминоген) фибринолитической активностью.

В ходе работы был получен и охарактеризован комплекс внеклеточных ферментов мицелиального гриба *Sarocladium strictum* 203. С помощью метода фибриновых пластин были показаны его прямое фибринолитическое (117,18 усл. ед./мг.) и выраженное активирующее плазминоген (112,09 усл. ед./мг.) действия. Использование хромогенных пептидных субстратов при изучении активности комплекса в отношении белков системы гемостаза показало, что механизм реализации непрямой фибринолитической активности сходен с действием урокиназного активатора плазминогена человека. Методом препаративного изоэлектрофокусирования было обнаружено наличие в комплексе трёх протеиназ с различными изоэлектрическими точками (pI 3,8, 7,3 и 10,3). Были рассмотрены специфичность и эффективность расщепления различных субстратов выделенными ферментами.

Полученные данные делают дальнейшее изучение и разработку комплекса весьма перспективным.

1. Мировая статистика здравоохранения, 2020: мониторинг показателей здоровья в отношении ЦУР, целей в области устойчивого развития [World health statistics 2020: monitoring health for the SDGs, sustainable development goals] – декабрь 2020. Женева: ВОЗ, 2020. – 92 p.
2. Versteeg H.H., Heemskerk J.W.M., Levi M., Reitsma P.H. New Fundamentals in Hemostasis // Physiological Reviews. – 2013. – Vol. 93, N 1. – P.327-358. DOI: <https://doi.org/10.1152/physrev.00016.2011>.

ВЛИЯНИЕ ГРАВИТАЦИОННОЙ РАЗГРУЗКИ СОЧЕТАННОЙ С ДЕНЕРВАЦИЕЙ НА ПАРАМЕТРЫ МОТОРНОГО ОТВЕТА КАМБАЛОВИДНОЙ МЫШЦЫ КРЫСЫ

Д.Э. Сабилова, М.Э. Балтин, А.А. Еремеев

Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия

sabirova.dianka@list.ru

Мышечная адаптация к микрогравитации может быть связана с изменениями в нервной системе. При моделировании денервации наблюдается полное отключение как афферентной, так и эфферентной регуляции, что выражается в бездействии мышцы, что позволяет использовать эту модель для изучения роли нервно-мышечной активности в регуляции функциональных свойств поперечно-полосатых волокон.

Целью исследования было оценить изменения в функциональном состоянии нейромоторного аппарата мышц крысы в период гравитационной разгрузки, сочетанного с денервацией.

Исследование проводили на нелинейных лабораторных крысах массой 180–200 граммов в соответствии с правилами обращения с лабораторными животными. В качестве модели гравитационной разгрузки использовали метод вывешивания по модели Е. Р. Морей-Холтон в модификации Е. А. Ильина и В. Е. Новикова. Нарушение нервного контроля осуществлялось по методике С. De Angelis. Оценивали параметры моторного (М-) ответа камбаловидной мышцы (КМ) крысы в следующих экспериментальных группах: антиортостатическое вывешивание (АОВ), сочетанного с денервацией (АОВ+ДЕН) и только денервация (ДЕН). В условиях денервации наблюдали устойчивый функциональный дефицит КМ, и электрическая активность КМ не восстанавливалась через 50 суток. Максимальная амплитуда М-ответа денервированной КМ после 7 суток при АОВ+Ден уменьшилась в 5 раз, через 35 суток наблюдали увеличение амплитуды М-ответа и через 50 суток условий АОВ+Ден амплитуда М-ответа денервированной мышцы не изменилась от предыдущих показателей 35-ти суток. Можно предположить, что изменение свойств мышцы при гравитационной разгрузке обусловлен, в том числе, изменениями нейронального контроля.

Работа выполнена в рамках программы «Стратегическое академическое лидерство Казанского федерального университета» (ПРИОРИТЕТ-2030).

МЕТОДИКА ЛОКАЛЬНОЙ ФИКСАЦИИ ПОТЕНЦИАЛА И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СУПЕРФУЗИОННОЙ КАМЕРЫ И ПРИЖИМНОГО УСТРОЙСТВА ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ БИОПОНЕНЦИАЛОВ НЕЙРОНОВ СОМАТОСЕНСОРНОЙ КОРЫ КРЫСЫ *IN VIVO*

В.М. Силаева, В.В. Шумкова, В.Р. Ситдикова, А.Е. Логашкин, М.Г. Минлебаев

ФГАОУ ВО Казанский Федеральный Университет Институт Фундаментальной Медицины и Биологии НИЛ “Нейрофизиология”, Казань, Россия

8.oktarina@gmail.com

Введение. Внутриклеточная регистрация электрической активности является “золотым стандартом” для описания поведения возбудимых клеток в физиологических и патологических условиях. Несмотря на то что методика локальной фиксации потенциала (patch clamp) ведет свою историю с прошлого века [1], [2], она до сих пор широко используется в нейрофизиологии [3]. Внутриклеточная регистрация *in vitro* является хорошо отработанной процедурой, однако использование методики локальной фиксации потенциала в *in vivo* условиях остается крайне сложной и мало распространенной техникой. В настоящей работе мы демонстрируем, что комбинация суперфузионной камеры (ранее нами запатентованной) позволяет облегчить проведение patch clamp регистраций *in vivo*.

Материалы и методы. Для реализации поставленной задачи мы провели серию экспериментов на крысах линии Wistar возраста P15–P30. Область неокортекса над соматосенсорной корой освобождалась от костей черепа.

Для снижения пульсаций коры больших полушарий мы использовали прижимное устройство, которое имеет вид прозрачной сеточки с множеством отверстий диаметром 300 мкм каждое. Открытая поверхность неокортекса постоянно перфузировалась раствором искусственной цереброспинальной жидкости физиологической температуры (ACSF). Для регистрации активности отдельных клеток использовались стеклянные микропипетки с сопротивлением 4-8 МОм, заполненные раствором CsGluc (для внутриклеточной регистрации токов проходящих через мембрану клетки) или раствором ACSF (с 1мкМ ГАМК, для регистрации ГАМК активируемых хлорных каналов в cell-attached конфигурации). Поиск клетки осуществлялся слепым методом.

Результаты. Полученные результаты показали, что суперфузионная камера с прижимным устройством позволяют эффективно снизить физиологические пульсации головного мозга и провести регистрацию активности отдельных нейронов с помощью методики локальной фиксации потенциала.

1. Neher E, Sakmann B. Single-channel currents recorded from membrane of denervated frog muscle fibres // Nature. – 1976. – Vol. 260 (5554). – P. 799-802.
2. Hamill OP, Marty A, Neher E, Sakmann B, Sigworth FJ. Improved patch-clamp techniques for high-resolution current recording from cells and cell-free membrane patches // Europ. J. Physiol. – 1981. – Vol. 391 (2). – P. 85-100.
3. Smith JC, Ballanyi K, Richter DW. Whole-cell patch-clamp recordings from respiratory neurons in neonatal rat brainstem *in vitro*. Neurosci Lett. 1992 Jan 6;134(2):153-6. doi: 10.1016/0304-3940(92)90504-z. PMID: 1589140.

2,4-ДИАЦЕТИЛФЛЮРОГЛЮЦИНОЛ ПРОТИВ *CANDIDA ALBICANS*

А.А. Степанов, А.С. Васильченко

Лаборатория антимикробной резистентности, Институт экологической и сельскохозяйственной биологии (X-Bio), Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

stepanov590@mail.ru

Микозы, вызываемыми грибами рода *Candida*, являются одной из ключевых проблем здравоохранения [1]. Перспективными кандидатами на роль антикандидных соединений являются вторичные метаболиты микроорганизмов, в частности, бактерий рода *Pseudomonas* [2]. Они обладают широким спектром антимикробной активности, в том числе в отношении дрожжеподобных и мицелиальных грибов. Однако особенности антифунгального действия данных соединений до конца не изучены.

Целью данного исследования стало изучение влияния ингибиторных и субингибиторных концентрации антимикробного метаболита *Pseudomonas protegens* CV3 2,4-диацетилфлороглюцинола (2,4-ДАФГ) в отношении *Candida albicans* ATCC 10231.

В качестве тест-штамма использовали *C. albicans* ATCC 10231. Изучено влияние 2,4-ДАФГ на биопленкообразование, мицелиально-дрожжевой диморфизм и секрецию гидролитических ферментов *C. albicans* ATCC 10231.

Выяснено, что 2,4-ДАФГ в субингибиторных концентрациях достоверно снижает биомассу и метаболическую активность формирующихся биопленок, а в ингибиторных меняет ультраструктуру гиф, создавая «каналы» на их поверхности. Кроме того, субингибиторные концентрации 2,4-ДАФГ негативно влияли на морфологический переход из дрожжеподобной формы в мицелиальную. Однако, 2,4-ДАФГ усиливал продукцию аспартил протеаз (Sap4-6) в биопленках *C. albicans* ATCC 10231. Внесение антиоксиданта Тролокса частично ингибировало секрецию аспартил протеаз.

Таким образом, возможным триггером секреции аспартил протеаз при воздействии 2,4-ДАФГ является внутриклеточная генерация активных форм кислорода при повреждении митохондрий и цитоплазматической мембраны клеток кандид.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FEWZ-2020-0006).

1. Cavalheiro, M., Teixeira, M.C. (2018). *Candida* Biofilms: Threats, Challenges, and Promising Strategies. *Front. Med.* 2018;5:28. doi: 10.3389/fmed.2018.00028
2. Ganeshan, G, Manoj Kumar, A (2006). *Pseudomonas fluorescens*, a potential bacterial antagonist to control plant diseases. *J Plant Interact* 1(3):123–134. doi.org/10.1080/17429140600907043

ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ СРЕДСТВ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ АГЕНТОВ НА ОСНОВЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ

Е.В. Субакаева, А.О. Хабибрахманова, П.В. Зеленихин

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, город Казань, Россия

zs_zs97@mail.ru

Разработка новых водорастворимых молекулярных систем доставки лекарственных агентов, способных повысить биодоступность и снизить токсичность противоопухолевых препаратов, является одной из приоритетных задач современной медицины и биологии. Среди множества носителей особый интерес представляют водорастворимые пиллар[5]арены. Многие производные пиллар[5]аренов проявляли низкую токсичность на животных моделях или вообще не проявляли ее, что еще больше увеличивало их спрос в области биофармацевтических применений, однако впоследствии были синтезированы соединения и с избирательно токсичными свойствами. Создается необходимость исследования биологических свойств новосинтезированных соединений, поскольку вещества, планируемые для использования в вышеупомянутых целях, должны отвечать требованиям биосовместимости и биобезопасности, поэтому целью настоящей работы стала оценка цитотоксического действия ряда пиллараренов в отношении клеток эпителия легкого эмбриона коровы ЛЕС.

Объектом исследования в данной работе выступали образцы пиллараренов AsN-298, AsN-300, AsN-302, AIG-205, AsN-294, AsN-305, сходные по составу, но отличающиеся функциональными группами, синтезированные и любезно предоставленные группой проф. д.х.н. Стойкова И.И. (Химический институт имени А. М. Бутлерова, КФУ).

Охарактеризована цитотоксичность пиллараренов AsN-298, AsN-300, AsN-302, AIG-205, AsN-294, AsN-305. Установлено, что соединения AsN-298, AsN-300, AsN-302, AsN-305 не проявляли статистически достоверной цитотоксической активности по отношению к клеткам ЛЕС во всем диапазоне исследованных концентраций 2-50 мкг/мл. Также было показано, что пилларарены AIG-205 и AsN-294, содержащие в качестве боковых заместителей фрагменты этилового эфира фенилаланина и этилового эфира триптофана, соответственно обладали способностью снижать жизнеспособность клеток ЛЕС при концентрации ≥ 25 мкг/мл. Значения IC_{50} веществ AIG-205 и AsN-294 составили 28.16 мкг/мл и 19.94 мкг/мл, соответственно. Таким образом, проведенное нами исследование подтвердило биосовместимость и биобезопасность пиллараренов AsN-298, AsN-300, AsN-302, AsN-305, что дает основания к их дальнейшему тестированию в качестве основы для систем доставки лекарственных агентов.

ВОДОРАСТВОРИМОЕ ПРОИЗВОДНОЕ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀ ИНДУЦИРУЕТ ГИБЕЛЬ РАКОВЫХ КЛЕТОК ПУТЕМ АПОПТОЗА

Г.Р. Тарасова^a, Г.М. Фазлеева^c, Л.Н. Исламова^c, Н.В. Калачева^b

^a *Медико-санитарная часть КФУ, Казань, Россия*

^b *Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия*

^c *Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*

7gulzada7@mail.ru

Апоптоз – это универсальный, энергозависимый процесс гибели клеток, который происходит в норме и при патологиях. Он играет ключевую роль в патогенезе многих заболеваний, в том числе, рака. Уклонение от клеточной гибели является одним из основных изменений в клетках, которые сопровождают их злокачественную трансформацию. В связи с этим, поиск веществ, способных избирательно индуцировать апоптоз только в раковых клетках, представляет собой перспективное направление в терапии злокачественных опухолей.

Объект настоящего исследования – полиолметанофуллерен C₆₀[C₉H₁₀O₄(OH)₄]₆. Ранее нами было установлено, что это водорастворимое производное фуллерена проявляет свойства мягкого разобщителя OXPHOS [1] и избирательно снижает ΔΨ_m в гиперполяризованных митохондриях опухолевых клеток [2]. Здесь мы оценили апоптоз-индуцирующий эффект полиолметанофуллерена на клетки опухолевых линий HCT-116, SNB-19 и MCF 7 с помощью проточного цитометрического анализа (Annexin V-FITC – PI). Результаты показали, что у всех трех клеточных линий полиолметанофуллерен вызывает гибель клеток путем апоптоза. Эффект зависит от концентрации соединения и времени его инкубации с клетками. После инкубации (48 часов) с полиолметанофуллереном (200 мкМ) показатели апоптоза составляли 32,8% (HCT-116), 46,53% (SNB-19) и 43,38 % (MCF 7). Полученные результаты обосновывают дальнейшее изучение полиолметанофуллерена в качестве нового противоопухолевого препарата.

1. Kalacheva N.V. et al. // Bioorg. Med. Chem. Lett. - 2018. - V. 28(6). - P. 1097-1100.
2. Tarasova G.R. et al. // J. Human gene therapy. - 2019. - V. 30. A. 65.

ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВАЦИИ ИНФЛАММАСОМ КЛЕТОК МИКРОГЛИИ НА МОДЕЛИ ТРАВМЫ СПИННОГО МОЗГА РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ ТЯЖЕСТИ *IN VITRO*

А.В. Тимофеева, Э.Р. Ахметзянова

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

anua_tima@mail.ru

Изучение поведения клеток микроглии при различных поражениях центральной нервной системы является актуальным направлением в современной нейронауке, а в особенности исследование поляризации данных клеток при травме спинного мозга (ТСМ). В данной работе была проведена количественная оценка популяций клеток микроглии с активацией инфламмасом NLRP3 в хронический период (60 сутки) ТСМ различной степени тяжести как в области приближенной к эпицентру повреждения (Th9), так и на удалении от него в области грудного верхнего отдела (Th3). Образование инфламмасом NLRP3 сильно коррелирует с пироптозом клеток микроглии, что в конечном итоге способствует секреции ими провоспалительных цитокинов [1].

При помощи Leica Impact One Stereotaxic Impactor For Reproducible Neurotrauma нами была смоделирована травма спинного мозга крысы на уровне позвонка Th8 слабой (1,5 м/с), средней (2,5 м/с) и тяжелой (4 м/с) степени тяжести. Количественную оценку клеток микроглии на фоне ТСМ проводили путем иммуногистохимического анализа с использованием антител к Iba1(+)/NLRP3(+) в зонах передних канатиков (VF), передних рогов (VH) и кортикоспинального тракта (CST). При оценке NLRP3⁺-клеток было обнаружено, что в зоне CST их количество выше при травме тяжелой степени тяжести в области Th3, однако в области приближенной к эпицентру повреждения самый высокий показатель был в группе со средней тяжестью травмы. Количество Iba1⁺/NLRP3⁺-клеток было выше в области грудного верхнего отдела с максимальным значением в зоне CST при сравнении с удаленными от эпицентра ТСМ участком Th3. Кроме того нами было отмечено скопление клеток микроглии кольцевидной формы (annular-shaped microglia) [2] в зоне CST и задних канатиков в месте, приближенному к эпицентру травмы Th9, а также в области верхнего грудного отдела.

Таким образом, после ТСМ различной степени тяжести наибольшие изменения в количественной оценке популяций клеток микроглии с активацией инфламмасом NLRP3 были обнаружены в области грудного верхнего отдела.

1. Kanneganti T. D. et al. Critical role for Cryopyrin/Nalp3 in activation of caspase-1 in response to viral infection and double-stranded RNA //Journal of Biological Chemistry. – 2006. – Т. 281. – №. 48. – С. 36560-36568.
2. Akhmetzyanova E. R. et al. Increasing Severity of Spinal Cord Injury Results in Microglia/Macrophages With Annular-Shaped Morphology and No Change in Expression of CD40 and Tumor Growth Factor- β During the Chronic Post-injury Stage //Frontiers in molecular neuroscience. – 2021. – Т. 14.

АНТИМИКРОБНОЕ ДЕЙСТВИЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ В ОТНОШЕНИИ КЛЕТОК *S. AUREUS*

Е.Ю. Тризна, Д.Р. Байдамшина, А.Р. Каюмов

Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань, Россия

trizna91@mail.ru

Распространение резистентности к противомикробным препаратам среди клинически значимых бактерий и грибов по сей день остается актуальной проблемой общественного здравоохранения. Для некоторых природных масел была показана способность синергически взаимодействовать с противомикробными препаратами, за счет нарушения целостности мембран клеток. Была оценена антимикробная активность бисаболола и эвкалиптола в отношении метициллин-чувствительных и метициллин-резистентных изолятов *S. aureus*.

Бисаболол и эвкалиптол проявляли умеренную активность в отношении клеток *S. aureus* (МПК составила 512–1024 мкг/мл). При этом оба вещества проявляли синергизм с амикацином в отношении 4 из 11 клинических изолятов (FICI=0.31–0.5) и аддитивное действие в отношении 7 из 11 штаммов с FICI=0.75. Синергетический и аддитивный эффект распределялся между чувствительными и резистентными к метициллину штаммами. Поскольку сообщалось о мембранотропных свойствах терпенов, мы исследовали влияние бисаболола и эвкалиптола на клеточные мембраны. Присутствие как бисаболола, так и эвкалиптола приводило к дозозависимому падению мембранного потенциала клеток *S. aureus*, аналогично хлориду бензалкония. Это позволяет предположить, что повреждение мембраны может быть возможным механизмом действия терпенов.

Таким образом наблюдаемая синергия бисаболола и эвкалиптола в сочетании с амикацином в отношении широкого спектра клинических изолятов *S. aureus* предполагает изучение синергии других аминогликозидов и открывает многообещающие перспективы для повышения эффективности антимикробной терапии инфекций, связанных с резистентными штаммами стафилококка.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности. Проект № FZSM-2022-0017.

ВЛИЯНИЕ ВНЕКЛЕТОЧНЫХ МЕТАБОЛИТОВ STAPHYLOCOCCUS AUREUS НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ PSEUDOMONAS AERUGINOSA К АНТИМИКРОБНЫМ ПРЕПАРАТАМ

М.С. Федорова, А.Р. Каюмов, Е.Ю Трizza

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

MaSFedorova97@mail.ru

На сегодняшний день более 80% инфекционных заболеваний в мире вызвано быстрым распространением бактериальной антибиотикорезистентности, связанной со способностью бактерий к формированию биопленок. Биопленки обладают различными механизмами толерантности, снижая эффективность антимикробных препаратов против патогенных бактерий, поэтому разработка новых терапевтических стратегий для борьбы с инфекциями является актуальной задачей. В настоящее время одним из наиболее распространенных условных патогенов и причиной широкого спектра внутрибольничных инфекций является *Pseudomonas aeruginosa*. Ранее нами было показано, что чувствительность *P. aeruginosa* к антибиотикам широкого спектра действия повышается в смешанной культуре *Staphylococcus aureus* - *P. aeruginosa*. Вероятно, это обусловлено действием внеклеточных метаболитов *S. aureus*. Для подтверждения этой гипотезы на первом этапе проводили подбор оптимальных условий культивирования *S. aureus* с целью получения культуральной жидкости (КЖ) с максимальным антимикробным действием, и оценивали антимикробную активность КЖ *S. aureus* как в отношении открепившихся клеток *P. aeruginosa*, так и в отношении клеток в составе биопленки. В результате снижение жизнеспособности клеток *P. aeruginosa* зависело от вносимой концентрации КЖ *S. aureus* и проявляло доза-зависимый эффект. Кроме того, известно, что некоторые бактериальные метаболиты способны повышать эффективность антибиотиков, проявляя синергетическое действие. Для проверки данного предположения оценивали синергизм КЖ *S. aureus* с антибиотиками широкого спектра действия в отношении клеток *P. aeruginosa*. В результате было показано, что присутствие культуральной жидкости *S. aureus* повышало эффективность антибиотика как в отношении свободноплавающих клеток *P. aeruginosa*, так и в отношении клеток в составе биопленки.

Дальнейшие исследования будут направлены на идентификацию данных метаболитов.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда (№20-64-47014).

СОВРЕМЕННЫЙ ПОДХОД В НАПРАВЛЕННОЙ ТКАНЕВОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ КОСТНОЙ ТКАНИ

А.Р. Хаирутдинова, Р.Г. Хафизов

Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

ajgele4ka@mail.ru

В последнее время применяются различные методы, направленные на увеличение и оптимизацию параметров альвеолярных отростков. Нарращивание же костной ткани в зоне дефекта челюстей с использованием остеокондуктивных материалов, насыщенных стромально-васкулярной фракцией жировой ткани является перспективной методикой увеличения кости в объеме [1].

Трансплантация аутологичных тканей человека для пластического замещения дефектов тканей его тела — хирургическая технология, юридически разрешена к применению в специализированных медицинских организациях РФ, в нашем случае это Научно-клинический центр прецизионной и регенеративной медицины ИФМиБ КФУ, на базе которого возможно выполнение крайнесложных задач в области медицины, в том числе при тканедефицитных состояниях в челюстно-лицевой области. От пациентов на добровольной основе было получено информированное согласие, необходимое для выполнения забора жировой ткани и операции по направленной тканевой регенерации [2].

Немаловажное значение в нашей работе имело выбор остеокондуктивного материала в качестве поставщика-носителя. Сложность применения суспензии СВФЖТ, заключается в том, что в отсутствии какого-либо материала поставщика-носителя она растекается в окружающие ткани. Остеокондуктивный никелид-титановый пористый порошок, который мы использовали в исследовании, имеет структуру с высокой степенью открытостью пор, обладает высокой биологической, биомеханической совместимостью [3].

В результате клинической апробации определены требования и разработаны методические и технические подходы к применению СВФЖТ для направленной регенерации костной ткани при дефектах челюстей. Жизнеспособность СВФЖТ с пористыми остеокондуктивными материалами продемонстрировали высокий уровень пролиферации, являясь идеальным субстратом, создающим благоприятные условия, как для роста клеток, так и для их пролиферации [4].

Сроки восстановления костной ткани сократились до 6 месяцев, а показатели функционирования имплантатов (ПФИ) через 6 месяцев после протезирования составили 0,9—1,0, что говорит об эффективности по ближайшим результатам функционирования ортопедических конструкций с опорой на внутрикостные имплантаты [5].

1. Хаирутдинова А.Р., Хафизова Ф.А., Миргазизов М.З., Хафизов И.Р. и другие (2015) Применение клеток стромально-васкулярной фракции из жировой ткани для замещения сегментарного дефекта гребня альвеолярного отростка челюсти собаки: экспериментальный случай // Гены и Клетки. Том 10, №4.- P. 110-113.
2. Хафизов Р.Г., Ризванов А.А., Хафизова Ф.А., Сергеев М.А., Хаирутдинова А.Р.(2016) Предклинические исследования применения продуктов клеточных технологий в дентальной имплантологии // МАЭСТРО стоматологии. №62.-С.39-43.
3. Khafizova F.A., Khairutdinova A.R., Khafizov I.R., Rizvanov A.A., Zakirova E.Y., Gunter V.E., Mirgazizov M.Z. (2017) Application of nanostructural granules «nitigran» with mesenchymal stem cells in dentistry // Human Gene Therapy. Vol. 28: A2–A125. – P. A89.
4. Khafizov I.R., Khafizova F.A., Zakirova E.Y., Zhuravleva M.N., Mavlikeev M.O., Khairutdinova A.R., Rizvanov A.A.(2017) The use of the membrane dye DiD to study migration of mesenchymal stem cells applied at the site of critical bone defect in rats // Human Gene Therapy. Vol. 28, Is. 12. P. A102.
5. Khairutdinova A., Khafizov I., Osin Y., Rizvanov A., Sharafutdinov I., Khafizov R.(2018) Assessing the quality of newly formed bone tissue using scanning electron microscopy // European journal of clinical investigation. Vol.48, Is..P. 218– 218.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ SARS-COV-2 S- И N-БЕЛКОВЫЕ ПЕПТИДЫ И КОМБИНАЦИИ ЦИТОКИНОВ В КАЧЕСТВЕ БИОМАРКЕРОВ У ПАЦИЕНТОВ С ЛЕТАЛЬНЫМ ИСХОДОМ COVID-19

Ш. Хамза, Е. Мартынова, М. Маркелова, Е. Гаранина, Ю. Давидюк,
В. Шакирова, А. Ризванов, С. Хайбуллина

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Shaimaa.hamza@mail.ru

Введение: Недавно возникшая коронавирусная болезнь 2019 года (COVID-19) остается глобальной угрозой, поскольку во всем мире зарегистрировано сотни миллионов случаев заболевания и более четырех миллионов смертей. Ранние признаки вероятности тяжелого течения COVID-19 могут повлиять на лечение и улучшить клинические результаты. Однако имеется ограниченная информация о том, как реактивность с поверхностным гликопротеином (S-белком) и нуклеокапсидным фосфопротеином (N-белком) SARS-CoV-2 различается между пациентами с COVID-19, нуждающимися в лечении в отделении интенсивной терапии (ОИТ), и пациентами с легкой формой COVID-19.

Материалы и методы: Образцы сыворотки от смертельных и несмертельных случаев COVID-19 использовались для анализа и количественной оценки реактивности с пептидами белков S и N SARS-CoV-2. Также анализировали уровень цитокинов в сыворотке крови.

Результаты: Мы показали, что IgM в сыворотке от фатального COVID-19 реагировал с несколькими пептидами N-белка, тогда как IgM от несмертельного COVID-19 реагировал с большим количеством пептидов S-белка. Кроме того, более высокий уровень провоспалительных цитокинов был обнаружен в сыворотке больных с летальным исходом по сравнению с несмертельным COVID-19.

Вывод: Мы разработали панель биомаркеров, которые можно использовать для прогнозирования риска летального исхода у пациентов с COVID-19 на ранней стадии заболевания, что может помочь в выборе правильного лечения.

АНАЛИЗ ПРОЛИФЕРАТИВНОЙ АКТИВНОСТИ И УСТОЙЧИВОСТИ К ЦИСПЛАТИНУ КЛЕТОК АДЕНОКАРЦИНОМЫ ПРОТОКОВ МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ ЛИНИИ MCF-7 ВЫДЕЛЕННЫХ ИЗ КСЕНОТРАНСПЛАНТАТА

Ч.Б. Харисова, А.В. Городилова, Ю.П. Маясин, К.В. Китаева,
И.Ю. Филин, Д.С. Чулпанова, В.В. Соловьёва, А.А. Ризванов

Институт Фундаментальной Медицины и Биологии КФУ, Казань, Россия

harisovachulpan@gmail.com

Введение. В противоопухолевой терапии аденокарциномы молочной железы применяется препарат первой линии - цисплатин (цис-диамминдихлороплатина (II)). Для изучения действия лекарственных средств широко используются ксенографтные опухолевые модели животных. Таким образом, **целью** нашей работы является анализ пролиферативной активности и устойчивости к цисплатину клеток аденокарциномы протоков молочной железы линии MCF-7 выделенных из ксенотрансплантата.

Материалы и методы. Измерение пролиферативной активности было проведено на приборе xCELLigence RTCA DP (Agilent, США) в режиме реального времени. По прошествии 24 часов от начала эксперимента вносили цисплатин с концентрацией 20 мкг/мл. Затем для определения жизнеспособности клеток был выполнен MTS-тест. Цисплатин добавляли в концентрации 20 мкг/мл после 48 часов культивирования. Также для выявления экспрессии маркера пролиферации Ki-67 были окрашены клетки методом иммуноцитохимии с использованием красителя DAPI. Результаты анализировали в лаборатории лазерной конфокальной микроскопии МДЦ АМ КФУ на приборе LSM 780 (Carl Zeiss, Германия).

Результаты и обсуждение. Было продемонстрировано, что нативные клетки линии MCF-7 обладали более высокой пролиферативной активностью по сравнению с клетками MCF-7, выделенными из ксенотрансплантата. Данные MTS-теста показали, что влияние на пролиферативную активность/жизнеспособность клеток цисплатин оказал именно на нативные клетки линии MCF-7. При окрашивании клеток методом иммуноцитохимии было выявлено, что между нативными клетками и клетками MCF-7, выделенными из ксенотрансплантата не выявлено значительных различий в экспрессии маркера пролиферации Ki-67.

ТВЕРДЫЕ ЛИПИДНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ КАК СИСТЕМЫ ДОСТАВКИ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

М.В. Хохлачев^a, Т.Н. Паширова^{a,b}, Л.Р. Идрисова^a, О.В. Цепяева^b,
В.Ф. Миронов^b, П. Массон^a

^a Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

m.khokhlachev@yandex.ru

В настоящее время лекарственные вещества (ЛВ), применяемые при лечении онкологических заболеваний, обладают рядом недостатков, такие как токсичность, плохая растворимость и низкая эффективность. Наномедицинские препараты являются терапевтическими средствами нового поколения, способные обеспечивать эффективность лечения рака за счет (i) избирательного транспорта ЛВ в мишени; (ii) преодоления биологических барьеров; (iii) защиты ЛВ от преждевременной дезактивации. В настоящее время существует несколько клинически-одобренных систем доставки, используемых для направленного лечения рака, большинство из них разработаны на основе липидов: липосомы, твердые липидные наночастицы (SLNs), наноструктурированные липидные наноносители (NLCs), наноэмульсий и т.д. [1, 2].

Целью работы является создание новых эффективных наноразмерных препаратов на основе SLNs для доставки противоопухолевых ЛВ. В качестве ЛВ использовались абетиновая (АБК, 0.01%, 0.05% и 0.1% масс.) и бетулоновая (БК, 0.1% масс.) кислоты. SLNs получены методом гомогенизации под высоким давлением. Методом динамического рассеяния света установлено, что диаметр SLNs при включении ЛВ увеличивается от 106 до 190 нм. Индекс полидисперсности SLNs составляет 0.24 при включении АБК и увеличивается до 0.4 в случае БК. Поверхностный потенциал SLNs уменьшается с -19.7 ± 0.7 мВ до -8.6 ± 0.5 мВ в случае включения АБК, и увеличивается до -23.8 ± 0.5 в присутствии БК. Эффективность капсулирования для АБК (0.01% масс.) в SLNs составляет 99 ± 4.9 %. *In vitro* высвобождение АБК (50%) из SLNs происходит в течение 1.5 часов, полное высвобождение АБК – в течение 24 часов.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

1. T. Date, V. Nimbalkar, J. Kamat et. al., *J. Control. Release*, 2018, **271**, 60–73.
2. A.C. Apolinário, L. Hauschke, J.R. Nunes et al., *Prog. Lipid Res.*, 2021, **82**, 101096.

ЛИЧНОСТНАЯ И СИТУАТИВНАЯ ТРЕВОЖНОСТЬ СТУДЕНТОВ

Т.Ч. Чан^{a,b}, Н.В. Звягина^a

^a Кафедра БЧиБС ВШЕНиТ САФУ, Архангельск, Россия

^b Российско-Вьетнамский Тропический научно-исследовательский и технологический центр,
Ханой, Вьетнам

trangtt189@gmail.com

Актуальность: Научные исследования психофизиологического состояния студентов высших учебных заведений разных стран демонстрируют повышенный уровень тревожности обследованных, что может повлиять на результаты обучения и быть причиной психологического стресса [1,2]. Высокий уровень тревожности может быть вызван интенсивной учебной нагрузкой, неблагоприятными экологическими факторами, негативным влиянием социально-экономических факторов, физиологическими особенностями, связанными со свойствами нервной системы и т.д..

Цель: Изучить влияние некоторых факторов на уровень тревожности студентов.

Объекты и метод: В исследовании участвовало 100 студентов в возрасте 18-24 лет, обучающиеся в Северном Арктическом федеральном университете, г. Архангельск (50 чел.) и в Ханойском Университете Естественных Наук, г. Ханой (50 чел.). Изучали уровень ситуативной и личностной тревожности с использованием шкалы тревожности Спилбергера-Ханина. Статистический анализ осуществляли с использованием программы SPSS26.

Результаты и обсуждение: По результатам нашего исследования, у 10% российских и 50% вьетнамских студентов, у 45% российских и 32% вьетнамских студенток выявлен высокий уровень ситуативной тревожности; у 40% российских и 63% вьетнамских студентов, у 57% российских и 32% вьетнамских студенток высокий уровень личностной тревожности. Кроме того, доля студентов до 20 лет с низким уровнем ситуативной и личностной тревожности была на 12% и 5% соответственно выше, чем в группе студентов старше 20 лет. По результатам корреляционного анализа выявлены статистически значимые связи между уровнем ситуативной тревожности и полом по группе российских студентов, между уровнем личностной тревожности и местом жительства у женской части обследованных, между уровнем тревожности и возрастом всех участников исследования ($p < 0,05$).

Заключение: Наши исследования выявили достаточно высокий уровень ситуативной и личностной тревожности у студентов России и Вьетнама, что отчасти может определяться местом жительства, возрастом и полом обследованных.

1. Maher D.F.F. et al Education in Medicine Journal. 2015; 7 (2): 52-59.
2. Ronny B. et al Journal of Affective Disorders January. 2018; 225 (1): 97-103.

ТЕРАПЕВТИЧЕСКИЕ ФЕРМЕНТСОДЕРЖАЩИЕ НАНОРЕАКТОРЫ ДЛЯ ДЕТОКСИКАЦИИ ФОСФОРОРГАНИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ ПАРАОКСОН

З.М. Шайхутдинова^{a,b}, Т.Н. Паширова^b, М.Н. Мансурова^a, Р.Р. Казакова^a,
Д.А. Татаринov^b, А.В. Богданов^b, П. Массон^a

^a Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

shajhutdinova.z@mail.ru

В настоящее время разрабатываются новые биомедицинские материалы, предназначенные для детоксикации/нейтрализации токсичных молекул при передозировке лекарств и ксенобиотиков, снижения химиотоксичности при терапии опухолевых заболеваний и т.д. Простейшие природные компартменты (везикулы) способны выполнять специфические функции во внутри и/или межклеточной среде. Синтетические везикулы (липосомы, полимерсомы, дендримерсомы) применяются в качестве нанореакторов (nR), где реагенты (токсиканты) проникают через слой (мембрану), а нетоксичные продукты высвобождаются во внешнюю среду [1]. Целью настоящей работы является разработка ферментативных nR для детоксикации фосфорорганического соединения параоксон (РОХ). В качестве фермента использовались высокоэффективные мутанты фосфотриэстеразы термофильных архей *Sulfolobus solfataricus* (PTE) [2]. В качестве nR - полимерсомы на основе блок-сополимеров PPS и PEG (ММ 750 и 2000). Методами динамического рассеяния света и электронной микроскопии установлено, что диаметр nR составляет около 100 нм (PDI = 0.2). Дзета-потенциал nR изменяется от -5 ± 1 до -25 ± 1 мВ, в зависимости от их концентрации. *In vitro* исследования показали, что nR с PTE (1 мкМ) инактивировали РОХ (5 мкМ) менее чем за 10 с. Установлена высокая *in vivo* эффективность nR, как при их профилактическом, так и лечебном введении мышам, за 5 мин до /1 мин после введения РОХ (в/к), соответственно. Сдвиги ЛД₅₀ составили $16.6\times$ ЛД₅₀ и $9.8\times$ ЛД₅₀ для nR-750 с PTE (1.6 нМ) и $23.5\times$ ЛД₅₀ и $7.9\times$ ЛД₅₀ для nR-2000 с PTE (0.37 нМ) при профилактике и лечении, соответственно. Таким образом, нанореакторы с PTE эффективны для детоксикации параоксона *in vitro* и *in vivo*.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект № 20-14-00155.

1. T.N.Pashirova, A.V.Bogdanov, P.Masson, *Chem.-Biolog. Interact.*, 2021, **346**, 109577
2. L.Poirier, P.Jacquet, L.Plener, P.Masson, et al., *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 2021, **28**, 25081-25106.
3. T.N.Pashirova, Z.M.Shaihutdinova, P.Masson et al. // *ACS Appl. Mater. Interfaces.*, 2022, **14**, 19241 - 19252.

ИЗМЕНЕНИЕ ВОЗБУЖДАЮЩЕГО ВХОДА НА НЕЙРОН ВО ВРЕМЯ ВЫЗВАННОЙ ФОКАЛЬНОЙ ЭПИЛЕПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ В НЕОКОРТЕКСЕ КРЫСЫ *IN VIVO*

В.В. Шумкова^a, В.Р. Ситдикова^a, М.Г. Минлебаев^{a,b}

^a ФГАОУ ВО Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

^b Средиземноморский институт нейробиологии (INMED), Марсель, Франция

victshumkova@gmail.com

Эпилепсия – хроническое заболевание нервной системы, сопровождающееся периодическими приступами гиперсинхронной нейрональной активности. Считается, что одним из ее основных механизмов является доминирование возбуждения над торможением в нейронной сети. Однако, остается неизвестным, это смещение связано с увеличением возбуждающих или же с уменьшением тормозных входов. Чтобы ответить на данный вопрос, мы оценивали глутаматные токи в контроле и во время вызванной эпилептической активности. Эксперименты проводились на взрослеющих крысах р18-27, где р0-день рождения. Использовался метод локальной фиксации потенциала *in vivo*. Клетки регистрировались на мембранном потенциале покоя в контроле и во время вызванной эпилептической активности. Эпилептиформная активность вызывалась с помощью инъекций 4-аминопиридина. Наши результаты показали, что эпилептиформная активность сопровождается усилением возбуждения в нейронной сети. В то время как в контроле средняя частота глутаматных токов составляет 1.1 ± 0.12 /сек. Во время 4-АП вызванной эпилептиформной активности частота глутаматных токов увеличивалась до 4.32 ± 0.47 /сек. Анализ синхронности показал, что во время эпилептической активности наблюдается прирост коэффициента модуляции в диапазоне ± 50 мс от тока. (контроль 0.52 ± 0.03 , эпилептиформная активность 0.67 ± 0.04). Это свидетельствует, что во время эпилептической активности токи становятся более синхронными. Несмотря на то, что для ответа на поставленный нами вопрос необходимо проведение дальнейших исследований, полученные нами предварительные данные говорят как об увеличении возбуждающего вклада, так и его синхронизации *in vivo*. Можно предположить, что эпилептическая активность приводила к сдвигу баланса в сторону возбуждения, что подтверждается с ранее продемонстрированными данными с использованием *in vitro* подходов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ No 22-25-00225.

НАНОРАЗМЕРНЫЕ АНСАМБЛИ НА ОСНОВЕ ВИОЛОГЕН РЕЗОРЦИНАРЕН КАВИТАНДОВ ДЛЯ УПРАВЛЯЕМОГО ПЕРЕНОСА СУБСТРАТОВ

А.А. Масленников^а, А.В. Шутова^а, А.Ю. Зиганшина^б, И.С. Антипин^а

^а Химический институт им. А. М. Бутлерова, КФУ, Казань, Россия

^б Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова, Казань, Россия

Под самосборкой понимают процесс объединения отдельных молекул в высокоорганизованные, упорядоченные ансамбли посредством нековалентных взаимодействий [1]. Данные ансамбли проявляют уникальные свойства, которые не характерны для индивидуальных молекул. Прежде всего это изменение морфологии под действием внешних факторов и обратимое связывание субстратов. Разработка самособирающихся ансамблей открывает большие перспективы в развитии фармацевтики, оптики, электроники и агропромышленности. Особенно важны самособирающиеся ансамбли в области медицины, как основа наноразмерных контейнеров для адресной доставки лекарственных веществ и препаратов для визуализации. Инкапсуляция лекарств в наноконтейнеры повышает их терапевтическую эффективность и позволяет уменьшить количество побочных эффектов, оказываемых на организм.

В работе представлен синтез виологен резорцинарен-кавитандов (MVCA, рисунок 1) для их будущего исследования и применения в качестве строительных блоков для создания наноконтейнеров лекарственных препаратов. Резорцинарены являются макроциклическими соединениями, образующимися конденсацией резорцинов с альдегидами. Резорцинарены склонны к самосборке, и ансамбли на их основе нашли применение в разделительной технике и в катализе [4]. Виологены – производные 4,4'-бипиридиний иона, являются хорошо известными соединениями, которые используются в качестве редокс-управляемых единиц в супрамолекулярных системах [5].

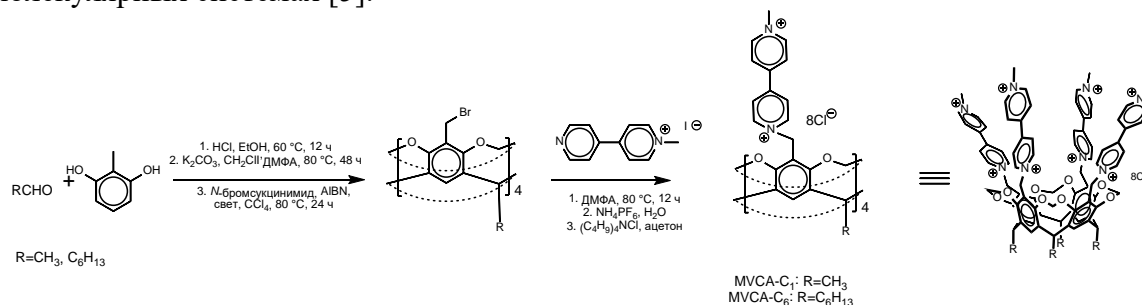


Рисунок 1. Схема синтеза MVCA.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (№ 0671-2020-0063).

1. Lehn J. Supramolecular Chemistry. *Science*, **1993**, 260, 1762–23.
2. Oshovsky G.V., Reinhoudt D.N., Verboom W. Supramolecular Chemistry in Water. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **2007**, 46, 2366–93.
3. Yadav S., Sharma A.K., Kumar P. Nanoscale Self-Assembly for Therapeutic Delivery. *Front. Bioeng. Biotechnol.*, **2020**, 00127.
4. Timmerman P., Verboom W., Reinhoudt, D.N. Resorcinarene. *Tetrahedron*, **1996**, 52, 2663-2704.
5. Monk P. M. S. The Viologens – Physicochemical Properties, Synthesis and Application of the salts of 4,4'-Bipyridine. *Wiley-VCH*; Chichester, **1998**.

ГИСТОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТИНА ЗАЖИВЛЕНИЯ РАН ПРИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ДИАБЕТИЧЕСКОЙ СТОПЫ

Х.И. Эрназаров, У.Ю. Эргашев

Ташкентская медицинская академия, Республика Узбекистан

Цель исследования. Изучение влияния препарата «Реоманнисол» на заживление раны с учетом патоморфологических аспектов.

Материалы и методы исследования. Экспериментальные опыты проведены на 100 белых крысах. Экспериментальные животные разделены на 2 группы: 1-ая контрольная – на экспериментальной модели диабетической стопы применение традиционного комплексного лечения; 2-ая группа опытная – традиционное лечение и реоманнисол.

Результаты. Через 24 часа в обеих экспериментальных группах после ранения размер раны увеличилась в обеих группах, поскольку края ран были растянуты дальше друг от друга из-за отека, отек распространилась на всю стопу, поверхности раневых дефектов были покрыты тонким струпом, образованным раневым отделяемым. Корочка легко повреждалась, просачивался прозрачный экссудат. Отмечаются ярко выраженные признаки воспаления: края раны отечны, гиперемированы с участками некроза, дно ран покрыто участками фибрина. Набухание в области раны стопы продолжалось у крыс контрольной группы на 7-8-й день, но у крыс опытной группы оно уменьшалось уже на 5-й день после ранения. На 7 день после ранения у крыс из опытной группы при использовании препарата, отмечено достоверное уменьшение площади ран ($4,3 \pm 0,05 \text{ мм}^2$; $P < 0,001$) в 2 раза чем своей изначальной раны, и в 1,5 раза чем у крыс контрольной группы ($6,5 \pm 0,07 \text{ мм}^2$), за счет раневой контракции и краевой эпителизации. У опытной группы корочка с раны удалялась с большим трудом, под ней располагался ярко гранулирующий раневой дефект с выраженными признаками краевой эпителизации, намного опережает контрольной группы. Также, наблюдается практически полное закрытие раневого дефекта, что превосходит данный показатель у опытной группы. Вокруг раны происходит восстановление шерстяного покрова. Отмечались начальные проявления краевой эпителизации – по краям раны был виден нарастающий на грануляционную ткань тонкий слой эпителия, в последующие дни его ширина увеличивалась. В контрольной группе обнаруживалась картина формирования малодифференцированной (грануляционной) ткани, местами сохраняются пленки фибрина, так же процесс васкулогенеза очень слабый. К 10-ым суткам в опытной группе, получавших традиционное лечение и препарат реоманисол, отмечено самостоятельное практически полное закрытие раневого дефекта и рост волос вокруг раны. В контрольной группе на 10 сутки сохранялся раневой дефект около $4,9 \pm 0,05 \text{ мм}^2$, рана зажила на 14-е сутки эксперимента.

Вывод. Скорость заживления раневых дефектов у крыс при синдроме диабетической стопы на местном традиционном лечении приходится на 14 сутки, в опытной группе, заживление раны зафиксировано на 10-е сутки с момента нанесения раны на ступню крыс.

ЛИКВИДАЦИЯ ЭНДОГЕННОЙ ИНТОКСИКАЦИИ С ПОМОЩЬЮ ОТЕЧЕСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА РЕОМАННИСОЛ ПРИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ДИАБЕТИЧЕСКОЙ СТОПЫ

Х.И. Эрназаров, У.Ю. Эргашев

Ташкентская медицинская академия, Республика Узбекистан

Цель исследования. Влияние препарата «Реоманнисол» на эндогенную интоксикацию в лечении экспериментальной модели диабетической стопы.

Материалы и методы исследования. Экспериментальные опыты проведены на 100 белых крысах. Экспериментальные животные разделены на 2 группы: 1-ая контрольная – на экспериментальной модели диабетической стопы применение традиционного комплексного лечения; 2-ая группа опытная – традиционное лечение и реоманнисол.

Результаты. Выявлено, что в начале эксперимента содержание МСМ в плазме (пл) крови и эритроцитах (эр) у животных контрольной группы (МСМ пл-6,1 усл.ед. \pm 0,22; СМ эр-7,3 усл.ед. \pm 0,25; $P<0,001$) и опытной группы (МСМ пл-6,1 усл.ед. \pm 0,17; СМ эр-7,0 усл.ед. \pm 0,16; $P<0,001$) составило приблизительно в 1,7 – 2 раза выше показателей интактной группы (МСМ пл-3,6 усл.ед. \pm 0,24; СМ эр-3,5 усл.ед. \pm 0,21). К 7-ым суткам в показатели ЭИ составили у контрольной группы МСМ пл-6,1 усл.ед. \pm 0,22; СМ эр-5,6 \pm 0,11 ($P<0,001$), который почти в 1,4 раза выше, чем показателя опытной группы МСМ пл-4,0 \pm 0,11; СМ эр-4,1 \pm 0,11. На 10 сутки у контрольной группы МСМ пл-4,9 \pm 0,10; СМ эр-5,2 \pm 0,11 ($P<0,001$), который почти в 1,3 раза выше, чем показателя опытной группы МСМ пл-3,7 \pm 0,14; СМ эр-3,7 \pm 0,12. К 14-ым суткам у контрольной группы признаки ЭИ сохраняются, МСМ пл-4,2 \pm 0,11; СМ эр-4,2 \pm 0,10 ($P<0,001$), который почти в 1,2 раза выше, чем показателя опытной группы МСМ пл-3,5 \pm 0,18; СМ эр-3,2 \pm 0,17.

В 1-ые сутки в контрольной олигопептиды в плазме 0,78г/л \pm 0,06; эритроцитах 1,16г/л \pm 0,07; $P<0,001$ (ОП пл и эр) и в опытной группах пл-0,77г/л \pm 0,04; эр-1,12г/л \pm 0,07; $P<0,001$ составили, которые, также значительно превышало на почти на 1,7 раза, чем значение в группе относительно интактных животных ОП пл-0,45г/л \pm 0,04; эр-0,68г/л \pm 0,04. У опытной к 10 суткам ОП пл-0,48 \pm 0,05; эр-0,72 \pm 0,05 и 14 суткам ОП пл-0,45 \pm 0,04; эр-0,68 \pm 0,02 – фиксируют показателей, соответствующих к интактной группе и нормализации патологического процесса в организме. В контрольной группе даже на 14 сутки показатели ОП остаются повышенным (пл-0,52 \pm 0,03; эр-0,77 \pm 0,04) в среднем 1,2 раза, чем у опытной группы, и состояние интоксикации сохраняется до конца

Вывод. Применения реоманнисола внутрибрюшинно зафиксировано резкий спад цифр ЭИ и к 10, 14 суткам сходны с интактной группой, так как, препарат выполняет «биохимическую санацию».

ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ АММОНИЕВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ 3-ГИДРОКСИПИРИДИНА: СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

А.С. Яндиминова, Н.В. Штырлин, Р.М. Вафина, Е.С. Булатова, С.В. Сапожников, М.Н. Агафонова, Р.Р. Казакова, Ю.Г. Штырлин

НОЦ фармацевтики КФУ, Казань, Россия

ASYandimirova@stud.kpfu.ru

Инфекционные заболевания, вызванные резистентными микроорганизмами, являются одной из важнейших проблем современного здравоохранения. Основным способом ее решения является разработка новых безопасных и эффективных в отношении, прежде всего, резистентных микроорганизмов препаратов.

Важнейшим классом антисептических средств являются четвертичные аммониевые соединения (ЧАС). В продолжение систематических исследований ЧАС на основе пиридоксина [1], в настоящей работе была синтезирована библиотека из 31 моно- и бис-ЧАС на основе его структурных аналогов - производных 3-гидроксипиридина (схема 1). Исследование их антибактериальной активности *in vitro* на музейных и клинических штаммах бактерий, а также токсичности *in vitro* позволило выявить бис-аммониевое соединение-лидер ($R_1=CH_3$, $R_2=C_{12}H_{25}$). Данное соединение проявило большую в сравнении с коммерческими антисептиками бензалкония хлоридом, мирамистином и хлоргексидином активность на клинических штаммах как грамположительных, так и грамотрицательных бактерий, а также более низкую в сравнении с бензалкония хлоридом и цетилпиридиния хлоридом токсичность *in vivo* (ЛД₅₀ = 826 мг/кг, мыши, пероральное ведение, протокол ЛЭК КФУ №24 от 22.09.2020).

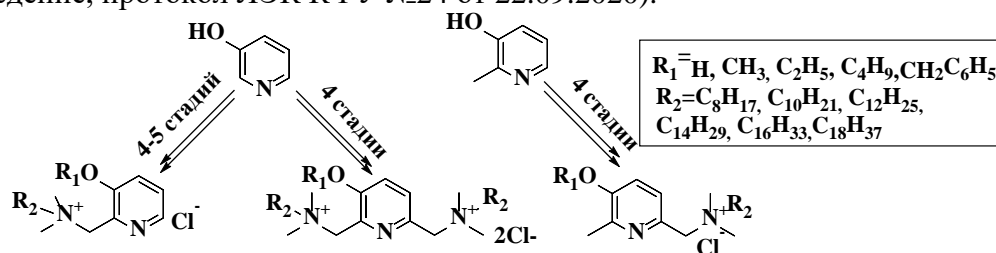


Схема 1. Синтез ЧАС на основе производных пиридина.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения проектной части государственного задания в сфере научной деятельности №0671-2020-0053.

1. Штырлин Ю.Г., Петухов А.С., Стрельник А.Д., Штырлин Н.В., Иксанова А.Г., Пугачев М.В., Павельев Р.С., Дзюркевич М.С., Гарипов М.Р., Балакин К.В. Химия пиридоксина в разработке лекарственных средств // Изв. АН. Сер. хим., 2019, №. 5, с. 911–945.

СЕКЦИЯ 2 БИОТЕХНОЛОГИЯ

АНАЛИЗ РОЛИ ГЕНОВ *OLI* ПУТИ В РЕГУЛЯЦИИ ДЛИНЫ ТЕЛОМЕР РАСТЕНИЙ *A. THALIANA*

И.А. Агабекян^a, А.Ю. Люшненко^a, Л.Р. Валеева^a, Л.Р. Абдулкина^a,
Е.В. Шакиров^{a,b}

^a Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

^b Университет Маршалл, Хантингтон, США

agabekian.inna@gmail.com

Теломеры – это естественные концы эукариотических хромосом, которые защищают их от прогрессирующего укорочения и ошибочного распознавания в качестве хромосомных разрывов. Теломерная ДНК состоит из множества коротких нуклеотидных повторов. Известно, что определенное количество теломерных повторов, полученное при рождении, изначально предопределяет способность большинства человеческих соматических клеток к пролиферации [1]. Главная задача наших исследований - поиск и анализ генетических факторов, ответственных за установление и регуляцию видоспецифичной длины теломер модельных растений *Arabidopsis thaliana*. Проведенные нами ранее эксперименты по изучению длины теломер позволили идентифицировать важный ген-кандидат *OLI2/NOP2A*, контролирующий длину теломер [2]. Ген *OLI2/NOP2A* ранее был также идентифицирован как часть генетического пути *OLIGOCELLULA* (*OLI*) [3]. Однако вклад остальных *OLI* генов в регуляцию длины теломер, в частности, генов *OLI1/HOS15*, *OLI5/RPL5A*, *OLI7/RPL5B* ранее не изучался. Таким образом, целью данной работы являлось изучение влияния генов *OLIGOCELLULA* на регуляцию длины теломер в *A. thaliana*. Для исследования влияния гена на длину теломер были получены мутантные растения с Т-ДНК вставкой в исследуемых генах. Анализ гомозиготных мутантов по гену *OLI1/HOS15* показал, что длина теломер мутантных растений увеличивалась в среднем на 500-800 п.о. Анализ длины теломер гомозиготных мутантов *oli5-3/rpl5a-3* показал, что длина теломер у мутантов была стабильно короче, чем у дикого типа. Длина теломер мутантов *oli7-2/rpl5b-2* уменьшалась незначительно из поколения в поколение. Таким образом, по предварительным данным, ген *OLI1/HOS15* является отрицательным регулятором длины теломер, а гены *OLI5/RPL5A* и *OLI7/RPL5B* являются положительными регуляторами длины теломер растений *A. thaliana*.

Исследование выполнено в рамках программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030) за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-14-00147).

1. Prochazkova Schruppfova *et al* Telomeres in Plants and Humans: Not So Different, Not So Similar. *Cells*. 2019;8(1):58. Published 2019 Jan 16. doi:10.3390/cells8010058
2. Abdulkina, L.R. *et al* Components of the ribosome biogenesis pathway underlie establishment of telomere length set point in *Arabidopsis* // *Nat Commun.* – 2019. – V.10. – P.5479.
3. Fujikura, U. *et al* Coordination of cell proliferation and cell expansion mediated by ribosome-related processes in the leaves of *A. thaliana* // *Plant J.* – 2009. – V. 59.- I. 3. – P. 499-508.

DIY ШПРИЦЕВОЙ НАСОС

А.С. Ананьев, М.Г. Минлебаев

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

anton990124@mail.ru

В ходе лабораторных исследований подопытные животные нуждаются в анестезии. Объем вводимого препарата зависит от массы животного, а введение избыточной дозы приводит к летальному исходу. Вследствие этого существует необходимость точной и стабильной дозировки объема и длительности введения препарата. С этой целью применяются шприцевые насосы. Коммерчески доступные системы, отвечающие исследовательским требованиям, имеют высокую стоимость и иностранное производство. Целью данного исследования было разработать доступный программируемый шприцевой насос.

Каркас программируемого шприцевого насоса выполнен из PLA пластика, напечатанным на 3D принтере. За механические движения отвечает один из самых распространенных шаговых моторов 28YBJ-48, с закрепленной к нему металлической осью диаметром 3 мм и шагом винта 0,1 мм. Для введения растворов использовался инсулиновый шприц объемом 1,0 мл. Электронное управление осуществляется с помощью микропроцессора ATMEL ATMEGA328P, выполненном в формфакторе Arduino Uno. Задание программы введения осуществляется через монитор последовательного порта. Источник питания – USB порт.

Разработанный шприцевой насос позволяет вводить растворы объемом до 1 мл в диапазоне скоростей от 2 нанолитров в секунду до 1,85 микролитров в секунду. Ориентировочная стоимость менее 2000 рублей, что позволяет использовать прибор в лабораториях с низким бюджетом.

ПРОТЕОЛИТИЧЕСКИЕ ФЕРМЕНТЫ МИЦЕЛИАЛЬНЫХ ГРИБОВ, АССОЦИИРОВАННЫХ С НАСЕКОМЫМИ

Д.Л. Басалаева^a, А.А. Богомолова^b, А.А. Осмоловский^a

^a *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ),
Москва, Россия*

dbasalaewa@yandex.ru

На сегодняшний день все еще остается актуальной проблема получения новых препаратов протеолитических ферментов, эффективных в отношении фибриллярных белков. Наиболее широко протеолитические ферменты, эффективные в отношении фибриллярных белков, применяются в пищевой промышленности, медицине и биотехнологии. В связи с этим актуальным является поиск и характеристика новых продуцентов протеиназ [1].

Целью данной работы было выделение микромицетов, ассоциированных с насекомыми и характеристика их протеолитического потенциала в отношении фибриллярных белков.

Для получения грибов использовали стандартную методику [2]. Насекомых растирали в стерильной фарфоровой ступке с добавлением стерильной дистиллированной воды и производили последовательные разведения гомогената до концентрации 10^{-3} м. к. / мл. Производили посев газонем по 100 мкл на чашки Петри с агаризованными питательными средами сусло-агар и Чапека-Докса с добавлением антибиотика. Посевы инкубировали при 28 °С в течение 4 - 7 суток.

Протеолитический потенциал в отношении фибриллярных ферментов оценивали с использованием агаризованной питательной среды с источниками белковых субстратов. В качестве субстратов использовали желатин, казеин, кератин и коллаген. Посев проводили уколом на чашку Петри и инкубировали при 28 °С в течение 2 - 4 суток. Учет проводили с визуализацией раствором Кумасси G-250 в хлорной кислоте. Результаты оценивали в энзиматических индексах EI (отношение диаметра зоны гидролиза субстрата к диаметру колонии исследуемого штамма) [3].

В результате было выделено 26 штаммов микромицетов, выделенных от насекомых из отрядов стрекозы, жесткокрылые, полужесткокрылые, чешуекрылые и перепончатокрылые. Первичный скрининг протеолитической активности показал, что 69,2% штаммов оказались способны к гидролизу казеина и 53,8% разлагали коллаген, кератин и желатин. Наиболее активно проявили себя штамм 3LN в отношении желатина ($EI_{\text{желатин}} = 1,82$) и 4LN в отношении казеина, кератина и коллагена ($EI_{\text{казеин}} = 2,75$, $EI_{\text{кератин}} = 1,83$, $EI_{\text{коллаген}} = 2,33$).

Результаты исследований показали, что более 50% ассоциативных микромицетов различных насекомых обладают протеолитическим потенциалом в отношении таких белков, как желатин, казеин, кератин и коллаген. Таким образом, представители микобиоты насекомых являются перспективными продуцентами протеолитических ферментов, эффективных в отношении фибриллярных белков.

1. Скрининг продуцентов протеиназ с фибринолитической и коллагенолитической активностями среди микромицетов / Т. С. Шаркова [и др.] // *Микробиология*. — 2015. — Т. 84, № 3. — С. 316–322.
2. Евлахова А. А. Энтомопатогенные грибы. Систематика, биология, практическое значение / А. А. Евлахова. - Л.: Наука, 1974. 260с.
3. *Aspergillus* proteolytic enzymes hydrolyzing fibrillar proteins for biomedicine and biotechnological processes / S. N. Timorshina [et al.] // *Moscow University Biological Sciences Bulletin*. — 2022. — V. 77, N. 3. — P. 178–183.

ОЦЕНКА ДЕЙСТВИЯ МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ВАРИАНТОВ *BACILLUS THURINGIENSIS* SPP. *AIZAWAI* НА КАРТОФЕЛЬ

Е.В. Бедарева^{a,b}, В.С. Масленникова^{a,b}, Г.В. Калмыкова^c, Н.И. Акулова^c, И.М. Дубовский^{a,b}

^a Томский государственный университет, Томск, Россия

^b Новосибирский государственный аграрный университет, Новосибирск, Россия

^c Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

shelikhova.ev@yandex.ru

Бактерии *Bacillus thuringiensis* широко известны благодаря своим избирательным действием против насекомых-вредителей различных отрядов за счет синтеза белкового дельта-эндотоксина (Cry белка). В результате изучения культуры бактерий *Bacillus thuringiensis* spp. *aizawai* (*B. thuringiensis* spp. *aizawai*) были выделены морфологические варианты с инсектицидной активностью (Cry⁺) и без нее (Cry⁻). Показано, что бактерии *Bacillus thuringiensis* проявляют фунгицидное действие в отношении фитопатогенов, а дельта-эндотоксин (Cry белок) оказывают ростостимулирующий эффект на растения.

Цель работы – оценка действия различных морфологических вариантов *B. thuringiensis* spp. *aizawai* на ростостимулирующие свойства картофеля и в отношении возбудителя ризоктониоза.

В результате полевых исследований отмечена эффективность морфологических вариантов *B. thuringiensis* spp. *aizawai* (Cry⁺ и Cry⁻) в отношении таких показателей, как биомасса растения, длина стеблей и количество столонов, по сравнению с контролем. Установлено, что применение морфовариантов *B. thuringiensis* spp. *aizawai* снизило распространенность ризоктониоза на всех неделях учета.

Таким образом, все морфологические варианты *B. thuringiensis* spp. *aizawai* (Cry⁺ и Cry⁻) оказали ростостимулирующее и фунгицидное действие на картофеле.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Федеральной научно-технической программы развития генетических технологий на 2019-2027 годы (Соглашение № 075-15-2021-1401 от 03 ноября 2021 года).

ЦЕЛЕВАЯ ИНАКТИВАЦИЯ ГЕНОВ БАЦИЛИЗИНА И БАКТЕРИОЦИНА В ГЕНОМЕ *BACILLUS PUMILUS* 3-19 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ CRISPR-CAS9

Ю.А. Васильева

Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

vasileva891@mail.ru

Представители рода *Bacillus*, эффективно продуцируют различные гидролитические ферменты, в том числе протеиназы, которые часто применяются в современной сельскохозяйственной, фармацевтической и пищевой промышленности.

Актуальными кандидатами для получения протеиназ являются бактерии *Bacillus pumilus* 3-19. Однако внеклеточное продуцирование целевого фермента с помощью бацилл затруднено из-за многих физиологических процессов таких как спорообразование, конкурентная секреция поверхностных липопептидов и антимикробных метаболитов. В связи с этим, мы предположили, что ресурсы клеток *B. pumilus* 3-19 будут использоваться более эффективно при экспрессии генов протеиназ после инактивации генов кандидатов бацилизина и бактериоцина.

Целью данного исследования являлась инактивация генов бацилизина и бактериоцина в геноме штамма *B. pumilus* 3-19. В работе использовался вектор pJOE9282.1, содержащий систему CRISPR-Cas9. В плазмиду интегрировали гидовую-РНК и фрагменты генов бацилизина и бактериоцина, которые были получены с геномной ДНК *B. pumilus* 3-19. Клонирование полученных конструкций проводили в клетках *E. coli* DH5a. Целостность подтверждена секвенированием. Для инактивации генов-мишеней, клетки *B. pumilus* 3-19 трансформировали полученными векторами. Эффективность трансформации составила ~121 и ~155 трансформантов/мкг ДНК. С помощью ПЦР анализа подтвердили наличие полученных конструкций. Целевую инактивацию генов проводили с помощью полученных плазмид. Таким образом, нами были получены мутантные штаммы *B. pumilus* 3-19 с неактивными генами бацилизина и бактериоцина. В дальнейшем планируется провести описание физиологических свойств полученных мутантных штаммов.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (приоритет 2030).

ХАРАКТЕРИСТИКА НОВЫХ ШТАММОВ ЛАКТОБАЦИЛЛ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В КАЧЕСТВЕ ПРОБИОТИЧЕСКОЙ ДОБАВКИ ДЛЯ КОРМОВ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ЖИВОТНЫХ

Е.А. Гаврилова, О.С. Карасева, Я.М. Наит, Е.А. Анисимова, Д.Р. Яруллина, А.Р. Каюмов

ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия

Alalila@yandex.ru

Производство пищевых добавок с пробиотическими препаратами является перспективным направлением создания новых кормов. Их применение способствует повышению резистентности животных к неблагоприятным факторам внешней среды, также улучшению иммунного статуса организма, стимуляции роста и развития молодняка, улучшению качества получаемой продукции. В роли пробиотических микроорганизмов могут выступать бактерии рода *Lactobacillus*. Нами были выделены из силоса более 200 штаммов молочнокислых бактерий, из которых 6 проявляли высокую степень антагонизма с бактериями в жидкой среде. Все бактерии были идентифицированы как *L. plantarum* (AG1, AG9, AG10 и AG15), *L. fermentum* (AG8) и *L. rhamnosus* (AG 16) на основе последовательности гена 16S rRNA.

Целью работы было охарактеризовать новые штаммы лактобацилл с точки зрения перспективы их использования в качестве пробиотических добавок сельскохозяйственных кормов.

Оценили минимальную подавляющую концентрации тяжёлых металлов для разных штаммов лактобацилл, выделенных из силоса, в среде и в адгезированной форме. Установили, что устойчивость адгезированных лактобацилл значительно выше, чем у свободноплавающих клеток. Наибольшую устойчивость к ионам тяжёлых металлов показал штамм *L. plantarum* AG15.

Оценивали биосовместимость по характеру роста колоний, посеянных перпендикулярными штрихами на агаризованной среде, на местах пересечения: совместный рост, угнетение роста или его стимуляция. Для сравнения брали также штаммы *L. fermentum* HFD1, *L. salivarius* LS 4-4, *L. plantarum* FCa3L, которые также показали свою перспективность. Все штаммы показали возможность к совместному культивированию, что показывает их биосовместимость.

Также оценили жизнеспособность лактобацилл, выращенных в молочной сыворотке, после иммобилизации на агроминералах: сапропеле, бентоните и циолите, являющиеся возможными добавками к сельскохозяйственным кормам. Установили, что жизнеспособность иммобилизованных лактобацилл выше, чем в контроле без добавления агроминералов, и сохраняется в течение 14 суток.

Таким образом, новые штаммы лактобацилл представляет интерес для их использования в сельскохозяйственной промышленности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 22-16-00040.

ИНАКТИВАЦИЯ ГЕНА СИГМА-ФАКТОРА СПОРООБРАЗОВАНИЯ (*SIGF*) *BACILLUS PUMILUS* 3-19 С ПОМОЩЬЮ СИСТЕМЫ CRISPR-CAS9

А.И. Гильмутдинова, Ю.В. Данилова

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт фундаментальной медицины и биологии, Кафедра микробиологии, Казань, Россия

aigwinrygilmyizn@gmail.com

Bacillus pumilus считается безопасным и имеет высокую промышленную способность секретировать экзоферменты, но данный микроорганизм сохраняет некоторые неодомашенные характеристики, повышающие его конкурентоспособность и выживаемость, такие как спорообразование, что повышает требования и трудность некоторых промышленных операциях. В связи с этим актуально оценить влияние инактивации гена *sigF* на получение аспорогенного штамма. Получение данного штамма проводили с помощью системы CRISPR-Cas9 типа II от *Streptococcus pyogenes*, недавно разработанной в качестве инструмента геномной инженерии для прокариот.

Для создания вектора, исключаяющего хромосомный участок *sigF*, в работе использовали плазмиду pJOE9282.1 [2] содержащая ген *cas9*. Данный вектор рестрицировали по сайту BsaI, вследствие чего фрагмент *lacZ* α заменяли на sgRNA, полученную путем гибридизации праймеров. SgRNA необходима для направления нуклеазы Cas9. Далее две фланкирующие последовательности гена мишени амплифицировали из геномной ДНК *B. pumilus* 3-19 и встраивали между двумя сайтами SfiI. Таким образом сконструирована плазида pGAs11.21 для инактивации гена *sigF*.

Данный вектор трансформировали оптимизированным методом электропорации [1] в клетки *B. pumilus* 3-19. Далее отбирали колонии трансформантов и использовали для инактивации гена *sigF*, которая осуществлялась при 30 °C на среде LA с добавлением 0.2 % ксилозы, необходимой для индукции *cas9*, находящегося под контролем ксилоза-индуцируемого промотора (P_{xyl}). Колонии, появляющиеся в течение 2 дней, помещали на среду LA без антибиотика и инкубировали при 42 °C. Повышение температуры должно приводить к потере плазмиды, это связано с тем, что pGAs11.21 имеет температура-чувствительный ориджин репликации pE194^{ts}. Полученные колонии отбирались для последующего подтверждения изменения гена с помощью секвенирования. Далее планируется изучение свойств мутантного штамма.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (приоритет 2030).

1. Danilova, I. V. Optimization of Electroporation Conditions for *Bacillus pumilus* 3–19 Strain [Text] / I. V. Danilova, N. L. Rudakova, Y.A. Vasilyeva, A. I. Gilmutdinova, I. V. Diadkina, D. I. Khasanov, M. R. Sharipova // BioNanoScience. – 2022. – V. 13(9). P. – 1-5.
2. Toymentseva, A. A. New CRISPR-Cas9 vectors for genetic modifications of *Bacillus* species [Text] / A. A. Toymentseva, J. Altenbuchner // FEMS Microbiology Letters. – 2019. – V. 366(1). – P. 284.

ЗНАЧЕНИЕ ПРЕНИЛИРОВАНИЯ В ОБЕСПЕЧЕНИИ АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ЭКСТРАКТОВ *MARCHANTIA POLYMORPHA*

С.М. Джабраилова, М.Р. Шарипова, Л.Р. Валеева

Институт Фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

saidabio@icloud.com

Вторичные метаболиты растений играют важную роль в их росте и развитии. Кроме того, синтез вторичных метаболитов является одним из основных механизмов защиты растений от биотических и абиотических стрессовых факторов. Разнообразие этих соединений обеспечивается за счет модификаций коровых структур, в числе которых немаловажное место занимает пренилирование. Большой интерес представляют полиизопренолы, обладающие антимикробным и противоопухолевым потенциалом. Целью данной работы является оценка влияния пренилирования на антимикробную активность экстрактов бриофита *Marchantia polymorpha*.

В геноме *M. polymorpha* нами обнаружено семь генов *цис*-пренилтрансфераз. Путем CRISPR/Cas9 редактирования были получены линии растений *M. polymorpha* с нокаутированным геном *цис*-пренилтрансферазы *MrCPT7.37*. Полученные линии характеризовались мутациями типа вставки-делеции в последовательности целевого геномного участка, причем три из них имели мутации, приводящие к сдвигу рамки считывания. При этом растения-нокауты сохраняли жизнеспособность и образовывали нормальный таллом. Мы определили антибактериальную активность экстрактов тканей трех линий растений-нокаутов и двух линий дикого типа *M. polymorpha*. Средние значения зон ингибирования роста грамположительных бактерий *S. aureus* ATCC25293 образцами экстрактов из тканей линий двух мутантных линий превышали показания для экстрактов растений дикого типа, хотя статистической разницы не обнаружено. Таким образом, растения *M. polymorpha* поддерживают способность образовывать антибактериальные метаболиты независимо от работы одной *цис*-пренилтрансферазы *MrCPT7.37*. В дальнейшем мы планируем изучить вклад всех *цис*-пренилтрансфераз в продукцию вторичных метаболитов, а также в развитие и антимикробный потенциал полипренолов бриофитов.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента СП-3391.2021.4 в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

РАЗРАБОТКА СПОСОБА ИММОБИЛИЗАЦИИ БИОСОВМЕСТИМЫХ МОЛОЧНОКИСЛЫХ БАКТЕРИЙ НА ПРИРОДНЫХ АГРОМИНЕРАЛАХ

О.С. Карасева, Е.А. Гаврилова, М. Наит Яхиа, А.Р. Каюмов, Д.Р. Яруллина

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Olkakarp66@gmail.com

Лактобациллы широко применяются в различных отраслях биотехнологии и пищевой промышленности. Бактерии этой группы привлекают такими своими качествами, как консервирующие свойства, антагонистическая активность против патогенов и благотворные эффекты на здоровье человека и животных. Целью данной работы является разработка синбиотического препарата на основе биосовместимых друг с другом штаммов лактобацилл и природных агроминералов.

В работе использовали пять штаммов лактобацилл, выделенных из растительного сырья и кишечника человека. С помощью совместного культивирования на МРС-агаре установили, что штаммы биосовместимы друг с другом и пригодны для использования в одной композиции. Разработали способ иммобилизации лактобацилл на сапропеле, бентоните и цеолите в питательной среде на основе молочной сыворотки. Визуализацию лактобацилл, иммобилизованных на носителях, проводили с помощью инвертированного микроскопа Olympus IX83, дополненного платформой сверхвысокого разрешения STEDYCON. Выживаемость лактобацилл в составе препарата оценивали капельно-чашечным методом. Установили, что агроминералы не оказывают отрицательного влияния на жизнеспособность клеток микроорганизмов. Жизнеспособность всех штаммов лактобацилл после иммобилизации сохранялась в высоких титрах - 10^9 - 10^{10} КОЕ/г.

Таким образом, в ходе работы были отобраны биосовместимые штаммы лактобацилл и разработан способ их иммобилизации на природных агроминералах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект РНФ-22-16-00040) в рамках Программы стратегического академического лидерства (ПРИОРИТЕТ-2030).

ВЛИЯНИЕ ПИРОГЕННОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ НА ФЕРМЕНТАТИВНУЮ АКТИВНОСТЬ МИКРОБИОМА ТУНДРОВЫХ ПОЧВ

Г.Г. Ключа, Е.А. Филимоненко

Центр изотопной биогеохимии, Институт экологической и сельскохозяйственной биологии (X-Bio), Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

gleb.klyuka@bk.ru

Огонь оказывает существенное влияние на экосистемы. Площадь пожаров и частота их возникновения в последние годы увеличивается и, как следствие, становится важным фактором, влияющим на экосистемы. Однако механизмы восстановления и изменения почвенного микробиома в результате пирогенной трансформации остаются малоизученными [1]. В результате наших исследований было обнаружено увеличение ферментативной активности в почвах, подверженных пирогенному воздействию. Этот эффект зависит как от типа почв, так и от количества времени, прошедшего после пожара. Также мы связываем это с изменением микробного состава почв, так как в результате пожаров в почву поступают зольные элементы, пирогенный или «черный» углерод, продукты дегидратации сложных углеводов и разрушения лигнина. Повышение ферментативной активности в почве возможно благодаря следующим факторам: 1) увеличению доступности источников углерода и энергии за счет термодеструкции биополимеров; 2) увеличению концентрации минеральных солей; 3) относительно слабого воздействия краткосрочного пожара на микробный пул [1]. Однако мы предполагаем, что со временем почвенный микробиом частично или полностью изменяется на фоне дефицита углерода и изменения физико-химического состава почвы. Об этом свидетельствует преобразование активности ферментов в зависимости от времени, прошедшего после пожара.

В ходе исследования нами было выяснено, что при низкой интенсивности горения, характерной для тундровых пожаров, наблюдается увеличение ферментативной активности, а, следовательно, и микробной биомассы. Также наблюдается высвобождение дополнительных количеств лабильного углерода, органических и минеральных форм азота, что поначалу имеет положительный эффект на микробиом, но со временем оказывает все более негативное влияние.

1. М.Н. Маслов, Л.А. Поздняков, О.А. Маслова Пирогенная трансформация тундровых почв (лабораторное моделирование) // Вестн. Моск. УН-ТА. СЕР. 17. Почвоведение. 2017. No 3.

НАГРЕВАТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА D1Y ДЛЯ ЛАБОРАТОРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ *IN VIVO*

А.Р. Мамлеев, А.Е. Логашкин, В.М. Силаева, М.Г. Минлебаев

ФГАОУ ВО Казанский Федеральный Университет Институт Фундаментальной Медицины и Биологии НИЛ “Нейрофизиология”, Казань, Россия

arsenmamleev2002@gmail.com

Введение. В процессе лабораторного исследования подопытное животное обычно долгое время находится на экспериментальной установке. Вследствие этого появляется необходимость в сохранении и поддержании физиологической температуры животного, что осуществляется с помощью дополнительных нагревательных систем, чаще всего вмонтированных в основу на которой находится объект исследования. Однако коммерчески доступные нагревательные системы характеризуются высокой стоимостью, что ограничивает их использование в нейробиологических исследованиях. Цель настоящего исследования: разработка и создание платформы с подогревом для проведения нейробиологических исследований *in vivo*.

Материалы и методы. Основным элементом нашей системы подогрева является основа, представленная каркасом из ABS пластика, напечатанным на 3D принтере. Для равномерного распределения тепла в основу платформы вмонтирована пластина из материала с высокой удельной теплопроводностью - алюминиевая пластина размерами 4x50x80 мм.

Нагревательным элементом являются 3 последовательно соединенных цементных резистора (SQP 10 Вт, 2.2 Ом), зафиксированных снизу к алюминиевой пластине с помощью моментного клея с прослойкой из термопасты (КПТ-8).

Контроль работы резисторов и, соответственно, калибровка температуры подогревателя осуществляется с помощью регулятора мощности, представленным системой из стабилизатора напряжения LM2596 DC-DC Module и термодатчика, с встроенным в пластмассовый каркас термистором. Источником питания является блок питания на 12 В.

Вывод. Созданная система позволяет поддерживать температуру платформы с рабочим диапазоном температур 20-70°C, что включает физиологические температуры большинства живых объектов, используемых в физиологических исследованиях. Ориентировочная стоимость созданной системы составляет менее 1500 рублей, что позволяет сделать и использовать эту систему в лабораториях с низким бюджетом.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЕ БАКТЕРИАЛЬНЫХ КОНСОРЦИУМОВ НА КУКУРУЗЕ

В.С. Масленникова^{a,b}, Е.В. Бедарева^{a,b}, С.М. Нерсеян^{a,b}, И.М. Дубовский^{a,b}

^a *Томский государственный университет, Томск, Россия*

^b *Новосибирский государственный аграрный университет, Новосибирск, Россия*

vladislava.maslennikova@mail.ru

В условиях интенсификации возделывания кукурузы особо актуальной становится проблема повышения эффективности защитных мероприятий, которые должны не только защищать растение на всех этапах органогенеза, но и сохранять почвенное плодородие без загрязнения окружающей среды. На данный момент в Западной Сибири для этого используют химические пестициды. Однако, у большинства микроорганизмов, вызывающих заболевания у кукурузы, формируется устойчивость к воздействию химикатов. Кроме того, химические препараты представляют опасность для биоценозов и их нельзя использовать при производстве органической продукции. Альтернативой химическим служат биологические препараты на основе микроорганизмов и их метаболитов. Целью данной работы являлась изучение влияния бактериальных консорциумов на рост и развитие кукурузы и ее почвенной микробиоты. Обработка семян кукурузы консорциумами приводила к изменению состава микробиоты почвы: увеличению количества бактерий, усваивающих минеральный азот, азотфиксирующих бактерий и целлюлозоразрушающих микроорганизмов. Воздействие бактерий сопровождалось изменением морфометрических показателей растений, повышало урожайность кукурузы. Таким образом, установлено, что бактериальные консорциумы при одновременном ростостимулирующем эффекте и увеличении продуктивности кукурузы в условиях Западной Сибири, также стимулировали развитие почвенной микробиоты.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Федеральной научно-технической программы развития генетических технологий на 2019-2027 годы (Соглашение № 075-15-2021-1401 от 03 ноября 2021 года).

ШТАММ *ASPERGILLUS NIGER* AM1 – ЭКСТРЕМОТОЛЕРАНТНЫЙ ОРГАНИЗМ

А.З. Миндубаев^a, Э.В. Бабынин^b, С.Т. Минзанова^c, Е.К. Бадеева^c

^a Казанский национальный исследовательский технологический университет

^b Татарский НИИАХП ФИЦ КазНЦ РАН

^c Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

mindubaev-az@yandex.ru

Наш коллектив занимается исследованием биodeградации более тринадцати лет. Исследованы экстремотолерантные штаммы *Aspergillus niger*, выделенные из уникального источника – емкости с кусковым белым фосфором. Они превращают токсичные соединения фосфора в безвредный фосфат, способный быть даже подкормкой для растений. Споры гриба выжили в этих экстремальных условиях! И, более того, аспергилл оказался способен обезвреживать белый фосфор. Работа может стать основой метода очистки сточных вод и загрязненных территорий [1, 2].

Теперь мы также исследуем биodeградацию при помощи обнаруженных нами аспергиллов веществ, не содержащих фосфор – борсодержащих инсектицидов [3], древесины и продуктов ее переработки, нефти. Планируем изучать переработку полимерных материалов при помощи обнаруженных штаммов.

В настоящее время работа ведется в рамках проекта Идея - 1000 Инвестиционно-Венчурного Фонда Республики Татарстан, в составе ООО Интехтокс, которое уже вошло в реестр участников проекта «Сколково», а в январе 2023 года отметит пятилетний юбилей.

1. A.Z. Mindubaev, E.V. Babynin, E.K. Bedeeva, et al. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2021, **66**, 8, 1239-1244.
2. A.Z. Mindubaev, S.V. Kuznetsova, V.G. Evtyugin, et al. *Applied Biochemistry and Microbiology*, 2020, **56**, 2, 194-201.
3. А.З. Миндубаев, Э.В. Бабынин, Г.Р. Ахмедова. *Южно-Сибирский научный вестник*, 2022, **4**, 38-44.

ОЦЕНКА УРОВНЯ ЭКСПРЕССИИ ГЕНОВ, УЧАСТВУЮЩИХ В СИНТЕЗЕ ВНЕКЛЕТОЧНОГО МАТРИКСА В МОНО- И ПОЛИМИКРОБНЫХ БИОПЛЕНКАХ *S. AUREUS* – *K. PNEUMONIAE*

А.В. Миронова, А.В. Каримова, А.Р. Каюмов, Е.Ю. Тризна

ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) Федеральный Университет», Казань, Россия

amironova2019@mail.ru

В естественных условиях бактерии предпочтительно существуют в виде полимикробных биопленок, состоящие из нескольких видов микроорганизмов. В составе полимикробных сообществ происходит смена метаболического профиля бактерий и, как следствие, изменение структуры и свойств биопленки, а также изменение чувствительности к противомикробным препаратам [1].

Ранее в нашей лаборатории было показано, что количество внеклеточного матрикса и его биохимический состав в смешанных сообществах *S. aureus* – *K. pneumoniae* изменяется, по сравнению с мономикробными биопленками тех же видов, в результате чего изменяется проницаемость матрикса и как следствие чувствительность микроорганизмов к антимикробной терапии. Однако, за счет какого организма происходит изменение биохимического профиля, не установлено.

Посредством полимеразной цепной реакции с обратной транскрипцией проводилась оценка экспрессии генов *icaA* и *icaR*, ассоциированных с синтезом полисахаридного межклеточного адгезина (PIA), который является доминирующим компонентом матрикса в биопленках *S. aureus* и экспрессию гена *pgaA*, который отвечает за синтез экзополисахаридов капсулы *K. pneumoniae*.

Было отмечено, что уровень экспрессии генов *icaA* и *icaR* понижается в полимикробных биопленках *S. aureus* – *K. pneumoniae* по сравнению с монокультурой *S. aureus*. Экспрессия гена *pgaA* достоверно не отличалась как в мономикробных биопленках *K. pneumoniae*, так и в смешанном сообществе. При этом относительная экспрессия гена *pgaA*, была выше экспрессии генов *icaA* и *icaR* в 10 000 раз, что свидетельствует о том, что синтез полисахаридов обеспечивается, за счет клеток *K. pneumoniae*, в то время как в клетках стафилококка метаболизм полисахаридов, входящих в состав биопленки подавлен.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (№ МК-3052.2021.1.4).

1. Cendra, M.D.M. Optimal environmental and culture conditions allow the in vitro coexistence of *Pseudomonas aeruginosa* and *Staphylococcus aureus* in stable biofilms [Text] / M.D.M. Cendra, N. Blanco-Cabra, L. Pedraz, E. Torrents // Scientific Reports. – 2019. – V.9. – P.1–9.

ХАРАКТЕРИСТИКА БИОСИНТЕЗА СИДЕРОФОРОВ РАЗНЫХ ТИПОВ БИОКОНТРОЛЬНЫМ ШТАММОМ *BACILLUS SUBTILIS* GM5

А.А. Николаева, Т.Е. Андреева, С.Ф. Хворова, Г.Ф. Лутфуллина

Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

azazel1212@rambler.ru

Для преодоления дефицита железа микроорганизмы продуцируют низкомолекулярные высокоаффинные хелаторы – сидерофоры. Была показана противогрибковая активность сидерофоров, что делает сидерофор-продуцирующие штаммы бактерий перспективными для использования в качестве биопрепаратов для защиты растений. Целью исследования был анализ влияния различных факторов (состав среды и метаболиты фузарий) на продукцию сидерофоров катехолового и гидроксаматового типа бактериями *Bacillus subtilis* GM5.

Штамм *B. subtilis* GM5 был ранее выделен из ризосферы картофеля. Штамм *Fusarium oxysporum* DR57 был выделен из клубней картофеля с сухой гнилью. *F. oxysporum* DR57 культивировали в картофельно-глюкозной сред (КГА) в течение 4 суток, супернатант после центрифугирования стерилизовали и использовали в качестве раствора экзометаболитов. Динамику накопления сидерофоров *B. subtilis* GM5 исследовали на минимальной среде М9 с 50 мкМ 2.2-бипиридил в качестве хелатора железа методом Арноу и Аткина. Исследовали влияние на продукцию сидерофоров добавления 5% и 10% экзометаболитов *F. oxysporum* DR57 или среды КГА.

Анализ продукции сидерофоров показал, что наибольшая концентрация (36 мкМ) сидерофоров катехолового типа наблюдается на 48 час культивирования. Продукция сидерофоров возрастала при добавлении в среду 10% метаболитов *F. oxysporum* DR57 и 10% КГА и достигала на 72 час культивирования 120 мкМ и 154 мкМ соответственно. На 72 час роста *B. subtilis* GM5 аккумулировал в среде 85 мкМ сидерофоров гидроксаматового типа, концентрация которых под влиянием 10% метаболитов *F. oxysporum* DR57 и 10% КГА до 131 мкМ и 191 мкМ соответственно.

Таким образом, показали, что штамм *Bacillus subtilis* GM5 является активным продуцентом сидерофоров катехолового и гидроксаматового типов, уровень накопления которых зависит от условий среды и различных метаболитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 22-16-00138 и Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

ПОЗИТИВНЫЙ КОНТРОЛЬ СИСТЕМЫ DEGS-DEGU ПЕРЕДАЧИ СИГНАЛА ЭКСПРЕССИИ АДАМАЛИЗИНОПОДОБНОЙ МЕТАЛЛОПРОТЕИНАЗЫ *V. PUMILUS*

Н.Л. Рудакова, Д.И. Хасанов

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

natalialrudakova@mail.ru

Внеклеточная металлоэндопептидаза *Bacillus pumilus* – минорный белок с не выясненной функцией. На основании первичной структуры фермент классифицирован как метцинкин, сочетающий в себе признаки двух семейств: астацинов и адамализинов. Это первый прокариотический гомолог семейства эукариотических адамализинов. Выяснение регуляторных сетей экспрессии гена, позволит оценить вклад этого фермента в интегрированный клеточный ответ.

Анализ промоторной области гена показал наличие сайтов связывания с фосфорилированной формой белка DegU~P. Это подразумевает участие регуляторной пары DegS-DegU в контроле экспрессии гена *mprBp*.

Для изучения роли системы DegS-DegU в регуляции экспрессии, ген *mprBp* в составе плазмиды pSA1 под собственным промотором был проклонирован в рекомбинантные штаммы, дефектные по генам регуляторной системы DegS-DegU. Клонирование гена *mprBp* в штамм *B.subtilis* 8G5 $\Delta degS-degU$, дефектный по генам *degS* и *degU* показало трехкратное снижение продуктивности металлопротеиназы по сравнению с продуктивностью штамма с функциональным *degS-degU* опероном. Это позволило предположить, что DegS–DegU система оказывает позитивное влияние на экспрессию гена *mprBp*.

Так же изучали экспрессию *mprBp* в штамме *B.subtilis* 8g5 DegU32 (Hy), у которого мутация в гене *degU* приводит к стабилизации DegU~P белка. Эта мутация приводит к многократному повышению уровня экспрессии генов, позитивно регулируемых системой DegS-DegU. Полученные нами данные показали 10-кратное увеличение продуктивности металлопротеиназы в рекомбинантном штамме *B. subtilis* 8G5 *degU32* (Hy) и позволили заключить, что фосфорилированная форма белка DegU активирует экспрессию гена *mprBp*.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (ПРИОРИТЕТ 2030).

АНАЛИЗ ТОКСИГЕННОЙ НАГРУЗКИ МИКРОЧАСТИЦ ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА НА *DROSOPHILA MELANOGASTER*: ТРАНСГЕНЕРАЦИОННЫЕ И ЭПИГЕНЕТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ

А.Р. Сайфутдинова, В.В. Костенко

Институт фундаментальной медицины и биологии, КФУ, Казань, Россия

aliya.sajfutdinova@list.ru, vvkostenko1@gmail.com

Микропластиковое загрязнение – это загрязнение частицами пластика размером до 5 мм. На сегодняшний день загрязнение микропластиком (МП) затрагивает и наземно-воздушную, и водную среды жизни [1,2]. В силу малого размера МП-частицы легко попадают в тела живых организмов, что негативно влияет на их жизнедеятельность. Например, микрочастицы полистирола способны накапливаться в печени, почках и кишечнике мышей *Mus musculus*. При этом в печени особей частицы МП вызывают воспаление и липидные капли [3]. Однако работ, в которых была бы исследована передача эффектов, вызванных МП, потомству, недостаточно. Поэтому целью данной работы была оценка возможности передачи негативных эффектов, вызванных микропластиками полиэтилентерефталата (ПЭТ) размером 0.1 мм, у *Drosophila melanogaster*.

Выявлено, что концентрации ПЭТ 0.02 г/мл и 0.04 г/мл в питательной среде дрозофил достоверно оказывают негативное действие на признаки плодовитости и жизнеспособности особей, приводя к снижению данных показателей на 50% по сравнению с контрольной группой ($p < 0.05$). в поколении дрозофил, которые на стадии личинки культивировались на среде с добавлением МП в исследуемые концентрации, были обнаружены особи с мутациями, модификациями и морфозами.

При анализе фертильности *D. melanogaster*, полученных от родителей, которые культивировались на стадии личинки на среде с добавлением ПЭТ в концентрациях 0.02 г/мл и 0.04 г/мл, не было обнаружено достоверного снижения жизнеспособности и плодовитости ($p > 0.05$). Однако, в поколении дрозофил, чьи родители были выращены на питательной среде с добавлением ПЭТ-МП в концентрациях 0.02 г/мл и 0.04 г/мл, также наблюдалось несколько особей с морфологическими дефектами.

Нами было показано, что негативные эффекты МП не передаются потомкам; вероятно МП в окружающей среде оказывает модификационное влияние и его токсический эффект исчезает при очищении среды обитания от токсиканта. У дрозофил, культивируемых со стадии яйца до стадии имаго на среде с добавлением ПЭТ в дозах 0.02 г/мл и 0.04 г/мл, наблюдалось ухудшение репродуктивных способностей. Однако, у их потомков, культивируемых со стадии эмбриона до стадии взрослой особи на среде без добавления ПЭТ, токсический эффект не наблюдался.

1. Thompson R. C. et al. Lost at sea: where is all the plastic? //Science. – 2004. – Т. 304. – №. 5672. – С. 838-838
2. Yang H. et al. Characteristics, toxic effects, and analytical methods of microplastics in the atmosphere //Nanomaterials. – 2021. – Т. 11. – №. 10. – С. 2747.
3. Deng Y. et al. Tissue accumulation of microplastics in mice and biomarker responses suggest widespread health risks of exposure //Scientific reports. – 2017. – Т. 7. – №. 1. – С. 1-10.

ЕСТЕСТВЕННОЕ РАЗНООБРАЗИЕ ТЕЛОМЕР У МОХООБРАЗНЫХ

А.В. Санникова^a, М.Р. Шарипова^a, Е.В. Шакиров^{a, b}, Л.Р. Валеева^a

^a *Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия*

^b *Department of Biological Sciences, College of Science, Marshall University, West Virginia*

Anastasya.sannikova@bk.ru

Теломеры являются базовыми структурами геномов эукариот. Структура теломер высоко консервативна у большинства организмов, в том числе у растений, однако открытым остается вопрос установления определенной длины теломер у представителей разных таксонов [1].

Целью работы было: исследовать длину и хромосомное распределение теломерной ДНК у представителей мохообразных. В работе были использованы аксеничные культуры мха *Physcomitrium patens* четырех экотипов, мох *Ceratodon purpureus* (мужское и женское растение), природные изоляты сфагнума и печеночник *Marchantia polymorpha*. Анализ длины теломер проводили методом TRF, совместно с Southern blotting [2].

Мы показали, что мохообразные обладают более короткими теломерами, по сравнению с покрытосеменными растениями (*A. thaliana*), длина теломер мохообразных имеет как внутривидовую, так и межвидовую вариабельность, а также является стабильным признаком в течение роста и развития растений. Показали, что в геномах всех исследованных экотипов присутствуют специфические теломерные последовательности внутрихромосомной локализации, причем большое количество таких последовательностей отличается своим расположением и длиной внутри видов и экотипов, что является отличительной характеристикой для геномов мохообразных. Дальнейшее исследование биологии теломер мохообразных позволит получить новые данные о механизмах регуляции длины теломер и их функциональной активности у наземных растений.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030) и финансирована грантом РНФ № 21-14-00147.

1. P. Schrupfova, S. Schorova, J Fajkus. *Front Plant Sci.*, 2016, **28**, 851.
2. L. R. Nigmatullina, *BioNanoScience*, 2016, **6**, 3-5.

НАТРИЕВАЯ СОЛЬ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНАЯ МАТРИЦА ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ ФИЦИНА

А.В. Сорокин^{a, b}, С.С. Гончарова^a, М.С. Лавлинская^{a, b}, Д.Е. Шевцов^a, М.Г. Холявка^{a, b},
В.Г. Артюхов^a

^a Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

^b Севастопольский государственный университет, Севастополь, Россия

andrew.v.sorokin@gmail.com

Целлюлоза является самым распространенным биополимером, характеризующимся доступностью, низкой токсичностью, биосовместимостью и неимунногенностью. Все это делает целлюлозу и ее производные перспективными материалами для использования в биомедицине и биотехнологии.

Фицин (КФ 3.4.22.3) – тиоловая эндопептидаза, обладающая широкой субстратной специфичностью, обуславливающей антибактериальную активность фермента. Однако ввиду особенностей строения активного центра каталитическая способность этого фермента в высокой степени зависит от влияния окружающих факторов. Для стабилизации активности фицина целесообразно проводить его конъюгацию с различными доступными биополимерами, например, производными целлюлозы.

В связи с этим, целью настоящей работы является исследование механизма взаимодействия фицина и натриевой соли карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ), а также оценка этого влияния на протеолитическую способность фермента.

Механизм взаимодействия исследовали с помощью методов ИК-спектроскопии и молекулярного докинга. Установлено, что конъюгирование осуществляется посредством образования водородных связей между аминокислотными остатками, входящими в состав α -спиралей и неупорядоченных областей глобул фицина, и углеводным остовом макромолекул модифицированных полисахаридов. Карбоксиметильные группы вступают, в основном, в гидрофобные взаимодействия с аминокислотными остатками неупорядоченных областей глобул фицина.

Исследование каталитической способности полученных конъюгатов показало, что они характеризуются меньшей общей, но более высокой специфической протеолитической активностью по сравнению с нативным ферментом: 43 и 306 %, соответственно, что указывает на гиперактивацию фермента. Это делает КМЦ перспективной матрицей для иммобилизации фицина.

ВЛИЯНИЕ 2,4-ДИАЦЕТИЛФЛЮРОГЛЮЦИНОЛА НА ФАКТОРЫ ВИРУЛЕНТНОСТИ *A. FUMIGATUS*

А.А. Степанов, А.С. Васильченко

*Лаборатория антимикробной резистентности, Институт экологической и
сельскохозяйственной биологии (X-Bio),
Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*

stepanov590@mail.ru

Грибы рода *Aspergillus* являются контаминантами пищевой продукции, а также патогенами человека и животных [1]. 2,4-диацетилфлороглюцинол (2,4-ДАФГ) – антибиотик, широко распространенный среди бактерий рода *Pseudomonas*, обладающий широким спектром антимикробной и антивирусной активности. Ранее мы выявили его субингибиторные эффекты в отношении *Candida albicans* [2]. Однако, особенности субингибиторного действия 2,4-ДАФГ в отношении мицелиальных грибов не известны.

Целью данного исследования стало изучение влияния ингибиторных и субингибиторных концентрации 2,4-ДАФГ в отношении *Aspergillus fumigatus* МХ-59.

Определенные значение МИК 2,4-ДАФГ в отношении *A. fumigatus* МХ-59 составило 120 мкг/мл. В субингибиторных концентрациях 2,4-ДАФГ подавлял способность *A. fumigatus* МХ-59 к формированию биопленок и снижал адгезию клеток к полистерену. Кроме того, субингибиторные концентрации 1/2-1/16 МИК 2,4-ДАФГ достоверно ($p < 0.05$) снижают гидрофобные свойства клеточной стенки, а также продукцию микотоксинов глиотоксина и фумагиллина *A. fumigatus* МХ-59. Вместе с тем, при обработке *A. fumigatus* МХ-59 субингибиторными концентрациями 1/2-1/4 МИК 2,4-ДАФГ наблюдалось увеличение секреции гидролаз.

Таким образом, предварительные результаты работы показали, что субингибиторные дозы 2,4-ДАФГ оказывают разнонаправленное воздействие на клетки грибов. С одной стороны, происходит подавление формирования биопленок и продукции микотоксинов, а с другой стороны, воздействие исследуемого антибиотика активизирует факторы неспецифической защиты *A. fumigatus*.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FEWZ-2020-0006)

1. Navale, V., Vamkudoth, K. R., Ajmera, S., & Dhuri, V. *Aspergillus* derived mycotoxins in food and the environment: Prevalence, detection, and toxicity // *Toxicology reports*, 2021, 8, 1008–1030. doi: 10.1016/j.toxrep.2021.04.013.
2. Stepanov AA, Poshvina DV, Vasilchenko AS. 2,4-Diacetylphloroglucinol Modulates *Candida albicans* Virulence // *Journal of Fungi*. 2022, 8(10):1018. doi.org/10.3390/jof8101018.

КОМПЛЕКСЫ ИНУЛИНАЗЫ КАК МОДЕЛЬ ЕЕ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ В УСЛОВИЯХ КРАУДИНГА

М.Г. Холявка, М.С. Кондратьев, В.Г. Артюхов

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

holyavka@rambler.ru

Инулиназа (КФ 3.2.1.7) гидролизует инулин и инулоолигосахариды и может использоваться для получения фруктозы из растительного сырья [1]. Целью нашей работы было создать комплексы инулиназы как модель ее функционирования в условиях краудинга путем поперечной сшивки молекул энзима.

В первой серии экспериментов мы *in silico* тестировали глутаровый альдегид в качестве сшивающего агента для сополимеризации молекул инулиназы методом гибкого докинга. Вероятно, отсутствие большого количества водородных связей, или ван-дер-ваальсовых взаимодействий, которые характерны для макромолекулярных лигандов [2], и явилось причиной наблюдаемых нами невысоких величин энергий связывания. Выявлена тенденция к отсутствию единого предпочтительного местоположения низкомолекулярного лиганда на поверхности белковой глобулы.

При сополимеризации молекул инулиназы глутаровым альдегидом в различных концентрациях нам не удалось сохранить более 20 % каталитической активности нативного ферментного препарата, поэтому мы предположили, что для инулиназы функционирование в условиях краудинга не является оптимальным, поэтому его стоит избегать в промышленных процессах.

Исходя из полученных данных ИК-спектроскопии, можно предположить, что существенное снижение каталитической активности инулиназы после сополимеризации ее молекул глутаровым альдегидом обусловлено значительными структурными перестройками и формированием более плотно упакованного гидрофобного ядра по сравнению с нативной формой фермента.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2020-2022 годы, проект № FZGU-2020-0044.

1. Ковалева Т.А., Холявка М.Г., Артюхов В.Г. // Биотехнология. 2012. № 1. С. 43-63.
2. Holyavka M.G., Kayumov A.R., Baydamshina D.R., Koroleva V.A., Trizna E.Yu., Trushin M.V., Artyukhov V.G. // International Journal of Biological Macromolecules. 2018. Vol. 115. P. 829-834.

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ МЕХАНИЗМ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ МАЛОГО БЕЛКА ТЕПЛООВОГО ШОКА АЛбрА *ACHOLEPLASMA LAIDLAWII*

Л.С. Чернова^{a,b}, И.Е. Вишняков^b, А.Р. Каюмов^a

^a *Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия*

^b *Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*

LSh-888@live.com

Микоплазма *Acholeplasma laidlawii* способна существовать вне организма хозяина и обладает самой высокой адаптационной способностью к различным стрессовым условиям среды среди микоплазм. Одним из инструментов для выживания в экстремальных условиях является экспрессия БТШ20 АЛбрА, количество которого в условиях теплового шока в клетках *A. laidlawii* возрастает до 7 % от общего количества клеточных белков. Предположительно, только те виды микоплазм способны выживать в окружающей среде, которые содержат ген БТШ20. Понимание роли и молекулярных механизмов функционирования и регуляции шаперонной активности БТШ20 АЛбрА, а также его взаимодействия с шаперонами А/DnaK и А/ClpB в процессе рефолдинга субстратных белков позволит охарактеризовать механизмы адаптации микоплазмы *A. laidlawii* к неблагоприятным условиям и могут стать фундаментальной основой разработки подходов для подавления ее роста. Целью работы явилось охарактеризовать роль и молекулярный механизм функционирования БТШ20 АЛбрА *A. laidlawii*.

Полученные данные демонстрируют нехарактерные для бактериальных БТШ20 особенности функционирования и регуляции шапероноподобной активности БТШ20 АЛбрА из *A. laidlawii*. Нами показано, что, в отличие от хорошо изученной системы, состоящей из двух БТШ20 (IbrA и IbrB), которые регулируют свою активность работая в тесной кооперации, АЛбрА из *A. laidlawii* представляет собой первый бактериальный БТШ20, который выполняет функции двух белков. Обнаружена четкая связь образования фибрилл АЛбрА и его способности предотвращать температурно-индуцированную агрегацию инсулина: если полноразмерный белок присутствует в виде смеси агрегатов, фибрилл и глобул, демонстрируя умеренную шапероноподобную активность, то стабильность и активность фибриллярных вариантов АЛбрА выше на 5-10 градусов. По всей видимости, аутоингибирующая активность N-концевого домена регулирует *in vivo* сдвиг четвертичной структуры белка в фибриллярную (активную) или глобулярную (неактивную) форму, представляя тем самым молекулярный механизм контроля активности АЛбрА в клетках *A. laidlawii* и определяет процесс дезагрегации белков с привлечением больших белков теплового шока А/DnaK и А/ClpB.

Таким образом, на основании полученных данных нами предложена модель функционирования белков АЛбрА – DnaK – ClpB в клетках *A. laidlawii*.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (Проект № 22-24-01150).

СОДЕРЖАНИЕ БЕЛКОВ В КЛЕТКАХ МИКРОВОДОРОСЛЕЙ ПРИ КУЛЬТИВИРОВАНИИ НА ЖИДКИХ ОТХОДАХ

К.А. Юрьева, С.С. Булынина, Э.Э. Зиганшина

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

КАYureva@stud.kpfu.ru

Зеленые микроводоросли – группа фотоавтотрофных организмов, являющихся перспективными объектами биотехнологии. Белки, липиды и углеводы являются основными компонентами клеток водорослей, но содержание их разнообразно и зависит от вида и условий культивирования. Сегодня многие исследования направлены на оптимизацию клеточного состава водорослевой биомассы с целью производства кормов, лекарственных препаратов и биотоплива [1]. Сточные воды содержат большое количество азота и фосфора. Методы, которые в настоящее время применяются для очистки вод от данных загрязнителей, требуют больших затрат. Внедрение микроводорослей в технологии очистки сточных вод привлекательно как из-за высокой степени очистки, так и ценности водорослевой биомассы [2].

В настоящей работе было изучено содержание белков в клетках водорослей семейств *Chlorellaceae*, *Scenedesmaceae* и *Neochloridaceae* при культивировании в среде роста на основе жидких отходов. Концентрацию белка определяли по методу Брэдфорда. В ходе эксперимента было выявлено, что максимальное содержание белка было отмечено в клетках водорослей *Scenedesmaceae* при культивировании на 20%-ном эффлюенте анаэробных систем конверсии остаточной биомассы (до 53% от сухой биомассы). Масштабирование технологии очистки сточных вод представителями микроводорослей представит экономичное и экологически безопасное решение для управления отходами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ и Кабинета Министров Республики Татарстан в рамках научного проекта № 22-24-20044.

1. Goncalves A. L., Pires J. C., Simoes M. A review on the use of microalgal consortia for wastewater treatment. *Algal. Res.* 2017, 24 403–415.
2. Monfet, E., Unc, A. Defining wastewaters used for cultivation of algae. *Algal. Res.* 2016, 24, 520–526.

СЕКЦИЯ 3 ХИМИЯ

МЕТОД ПРОЕКТОВ В ОБУЧЕНИИ ХИМИИ ДЕТЕЙ МИГРАНТОВ

И.И. Агзамова, Д.Л. Дарземанова

Химический институт имени А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

Agzamovain01@mail.ru, darzemanova.diluara@mail.ru

Метод проектов играет важную роль в формировании компетенций учеников, что прописано в нормативно-правовых документах общего образования.

Цель исследования – выявление положительных результатов в обучении детей мигрантов через метод проектной деятельности.

Вопросы методического сопровождения обучения детей мигрантов в России на государственном уровне были определены в 2015 году уточненными требованиями профессионального стандарта учителя современной школы. Исследования начались в 2014 году с опроса практикующих учителей и студентов – будущих учителей по проблемам применения метода проектов в обучении химии детей мигрантов (подробнее в [1, С. 86-88]). Анализ результатов опроса подтвердил предположение о необходимости более широкого использования метода проектов в обучении химии с целью формирования химико-экологической культуры обучающихся и развития у них мотивации к обучению химии.

Метод проектов был реализован нами в МАОУ «Лицей №131» г. Казани и в МБОУ «Средняя общеобразовательная русско-татарская школа №111» г. Казани начиная с 2017 года по настоящее время. Были выполнены такие проекты, как «Исследование аквариумной воды на содержание различных веществ», «Качественный анализ чипсов разных марок», «Пища глазами химика», «Анализ образцов вод различных озер Казани», «Химический состав мармелада», «Шоколад. Полезное или вредное лакомство?» и другие. Критериями сформированности химико-экологической культуры обучающихся служат мотивационные, когнитивные и деятельностные компоненты. Результаты опытно-экспериментальной работы свидетельствуют о положительной динамике в формировании химико-экологической культуры детей мигрантов и повышении мотивации к обучению химии.

1. Космодемьянская, С.С. Вопросы готовности учителей химии к работе с детьми мигрантов / С.С. Космодемьянская, Д.Л. Дарземанова // Всеросс. науч.-практ. конфер. с междун.участием (г. Казань, 25-26.03.2015). Изд-во Казан. ун-та, 2015. -196 с.

СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ *N*-АЦЕТИЛ-D-ГЛЮКОЗАМИНОФОСФОНАТОВ С 1,2,3-ТРИАЗОЛОВЫМ ФРАГМЕНТОМ.

Р.Ф. Азнагулов^{a,b}, Л.Р. Хабибулина^a, Б.Ф. Гарифулин^{a,b}, А.Д. Волошина^a,
Д.Ф. Абрамова^a, А.Б. Выштакалюк^a, В.Е. Катаев^a

^a *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*

^b *ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

aznagulov.ravil@yandex.ru

Фосфонатный и углеводный фрагменты играют определяющую роль в активности многих лекарственных средств. Кроме того, было показано, что присоединение α -аминофосфонатного фрагмента к природным соединениям является эффективным методом усиления биологической активности [1]. Поэтому синтез неизвестных ранее гликозиламинофосфонатов и исследование их биологической активности является перспективным направлением поиска новых лекарственных препаратов, тем более что представители этого класса соединений на данный момент недостаточно изучены.

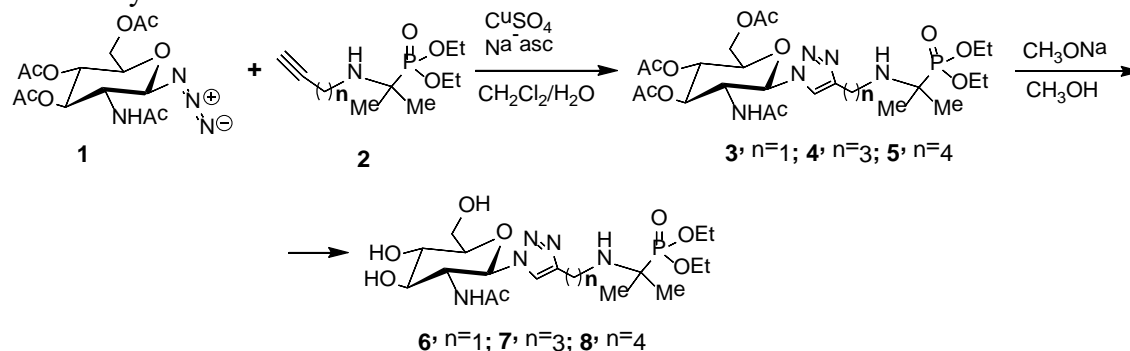


Схема 1 – Синтез гликозиламинофосфонатов с 1,2,3-триазилилсодержащим фрагментом.

Мы синтезировали *N*-ацетил-D-гликозаминаминфосфонаты с 1,2,3-триазилилсодержащим фрагментом **3**, **4**, **5** и **6**, **7**, **8** (см. схема 1), у которых была исследована цитотоксичность в отношении линий раковых клеток человека A549, M-HeLa, HuTu80, PanC-1, MCF-7 и T89G, и здоровой клеточной линии Wi-38. Все полученные соединения умеренно токсичны в отношении M-HeLa и высокотоксичны в отношении MCF-7. Наилучшую активность проявило соединение **7** ($IC_{50} = 17.0 \text{ мкМ}$).

Работа выполнена в рамках государственной темы «Создание научной платформы для направленного молекулярного дизайна и получения биологически активных веществ с целью разработки средств диагностики и лечения заболеваний человека и животных», № темы FMEG-2022-0001, № государственной регистрации в ЦИТус: 122011800131-8.

1. Chen Y.-Y. Et al. *Bioorg. Chem.* **2021**, *114*, 105065

ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНО-ГРАДИЕНТНЫХ МАТЕРИАЛОВ АДТИВНЫМИ МЕТОДАМИ

Я.Ф. Алиалшами^а, Д.А. Балькаев^б

^а Казанский национальный исследовательский технический университет – КАИ
им. А.Н. Туполева, Казань, Россия

^б Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

yahiaalsami1995@gmail.com

Функционально-градиентные материалы (FGM) передовые материалы, которые имеют заданный градиент свойств по всей структуре и определяются в соответствии с их гетерогенными компонентами/составами. FGM могут быть изготовлены с использованием различных хорошо зарекомендовавших себя методов получения, однако большинство из них имеют существенные ограничения. Новые технологии, такие как аддитивное производство, обеспечивают более высокий уровень управления пространственным разрешением и предлагают интересный способ решения проблем существующих методов.

Цель этой работы состоит в изучении технологических особенностей получения градиентных материалов, сочетающих высокую ударпрочность и жесткость на основе ряда полипропилена и наполнителей (стекловолокна, графит и др.). Образцы изготавливались методом 3Д печати с заданным плавным изменением состава и соответственно свойств с использованием филаментов с различным содержанием наполнителей. Филаменты изготавливали экструзией полимеров с добавлением заданного количества наполнителей. Для сравнения были получены ряд гомогенных материалов с заданным содержанием наполнителей. Были проведены физико-механические испытания на изгиб, растяжение и удар пластин на основе градиентных и, для сравнения, ряда гомогенных материалов. Полученные результаты показали, что в градиентных материалах можно сочетать достаточно высокую жесткость и ударную прочность, в то время как в гомогенных материалах эти свойства взаимно исключаются. Кроме того, были проведены исследования градиентных материалов с различным профилем изменения состава, показано, что плавное изменение состава позволяет получать материалы с меньшими внутренними напряжениями на границе изменения состава и, соответственно, с более высокими прочностными характеристиками градиентного материала. Получены оптимальные профили распределения состава для различных композиций и предложены градиентные материалы для получения изделий методом 3Д печати изделий различного назначения.

ЯМР-РЕЛАКСАЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИПЛЕКСОВ В ВОДЕ

Р.Р. Амиров, Е.А. Чернуха, А.Ю. Савенков

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

rramirov58@mail.ru

Одним из перспективных направлений современной координационной химии является исследование роли парамагнитных ионов d-металлов в образовании устойчивых полиплексов в водных и в высокоорганизованных водных средах, полиплексы на основе полиэлектролитов нашли широкое применение в медицине и в качестве магнитных меток.

Полиплексы представляют собой комплексы ионов металлов, или ДНК с полиэлектролитами, обладающими катионной или анионной функцией, образующихся за счет электростатического взаимодействия. В качестве катионного полимера при образовании полиплексов могут выступать полиэтиленимин, полилизин, хитозан, дендримеры.

Образование полиплексов возможно контролировать методом ЯМР-зондирования: значительный рост релаксационной эффективности в растворах тиронатных комплексов гадолиния(III) в широкой области pH объяснен связыванием их с катионными центрами в цепи полиэтиленимина (ПЭИ), последующее добавление анионов полистиролсульфоната (ПСС) не приводит к существенному вытеснению ПЭИ-связанных металлокомплексов в воду, что указывает на наличие целевых полиплексов в водных растворах.

Методом ЯМР-зондирования установлено образование полиплексов в системе Gd(III)-Tir-ПЭИ-ПСС на основе парамагнитных ионов гадолиния(III) и избытка тирона путем взаимодействия с анионным полимером полистиролсульфонатом натрия (ПСС) и катионным полимером полиэтиленимином (ПЭИ). Данные полиплексы образуются при соотношении компонентов 1:2.5:115:10 и устойчивы в широкой области pH 4-10.

В присутствии физиологической концентрации хлорида натрия (150 мМ) происходит частичное разрушение полиплекса в системе Gd(III)-Tir-ПЭИ-ПСС при pH > 8, что может быть обусловлено ослаблением связи между катионным и анионным полимерами.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ РАДИКАЛЬНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СРЕДЕ

Е.К. Башкиров^a, А.В. Асташова^{a,b}

^a Самарский национальный исследовательский университет, Самара, Россия

^b Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН, Самара, Россия

avastas2345@gmail.com

На сегодняшний день одной из актуальных вопросов для научного мира является вопрос возникновения и эволюции органических молекул в Галактике. Так, уже удалось обнаружить более 200 межзвездных и околозвездных молекул [1,2], большая часть которых является органическими. Установлено, что данные органические вещества синтезируются в межзвездной среде за счет действия ионизационного излучения: покрытая космическим льдом межзвездная пыль подвергается воздействию ультрафиолетовых фотонов в холодных молекулярных облаках [3], уплотняя их. Под действием собственной гравитации они начинают процесс формирования звезд, зависящий от соответствующего молекулярного состава. Это подтверждает необходимость установления путей синтеза молекул в межзвездной среде.

Учитывая вышесказанное, в данной работе рассматриваются реакции взаимодействия образовавшихся под действием ионизационного излучения радикалов с основными компонентами космического льда на примере реакций взаимодействия CH_3 и H_2O , CH_4 и CH_3 , C_2H_5 и CH_4 , C_2H_5 и $\text{CH}_3\text{-OH}$, C_3H_7 и H_2O в газовой фазе. Для всех реакций были получены оптимизированные геометрии реагентов, продуктов и переходных состояний и колебательные частоты на уровне теории функционала плотности B3LYP/6-311G (d,p) и относительные энергии на уровне теории G3(MP2,CC)/6-311G (d,p) с химической точностью, рассчитаны константы скорости. Установлено, что в условиях космоса данные реакции в газовой фазе не протекают.

1. D. C. B. Whittet, A. M. Cook, E. Herbst, J. E. Chiar, and S. S. Shenoy, Observational Constraints on Methanol Production in Interstellar and Preplanetary Ices. // *The Astrophysical Journal*, 2011, v. 742, p. 28-38.
2. E. Herbst, Chemistry in the Cold, Warm, and Hot Interstellar Medium. // *First International Conference on Chemical Evolution of Star Forming Region and Origin of Life*, 2013, v.1543, p. 15-30.
3. Y. Aikawa, V. Wakelam, R. T. Garrod, and E. Herbst, Molecular Evolution and Star Formation: From Prestellar Cores to Protostellar Cores. // *The Astrophysical Journal*, 2008, v. 674, p. 984-996.

ТЕРМОДИНАМИКА ОБРАЗОВАНИЯ И СТРУКТУРА КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С НОВЫМ ГИДРАЗОНОВЫМ ПРОИЗВОДНЫМ

Мохамед А. Ахмед, Э.М. Гилязетдинов, Н.Ю. Серов, М.С. Бухаров, В.Г. Штырлин

Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского федерального университета, Казань, Россия

ch.mohamedaly88@yahoo.com

Одной из крупных проблем современности является распространение туберкулеза. Имеющиеся лекарства для лечения туберкулеза обладают многими побочными эффектами и малоэффективны в борьбе с новыми штаммами. В этой связи разработка новых эффективных противотуберкулезных препаратов с минимальным побочным действием является серьезным вызовом для современной науки.

В продолжение работ [1, 2] методами рН-потенциометрии и СФ-метрии изучена термодинамика комплексообразования в растворах синтезированного в КФУ нового кандидата в противотуберкулезные средства – (E/Z)-N'-((5-гидрокси-3,4-бис(гидрокси-метил)-6-метилпиридин-2-ил)метил)-изоникотиногидразида (А) [3] – с рядом 3d-металлов {Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II)}. Константы образования и спектральные параметры комплексов рассчитаны по авторской программе STALABS. Некоторые из обнаруженных комплексов выделены в кристаллическом виде и охарактеризованы методом РСА, а также смоделированы методом квантовой химии (DFT) на уровнях САМ-В3LYP/TZVP и РВЕ/TZVPP с учетом эффектов растворителя в модели С-РСМ.

1. Гилязетдинов Э.М., Мохамед А. Ахмед, Хазиев Р.М., Штырлин Н.В., Бухаров М.С., Серов Н.Ю., Штырлин В.Г. *Сб. материалов XV Всероссийской молодежной научно-инновационной школы «Математика и математическое моделирование»* (Саров, 13-15 апреля 2021 г.). Саров, 2021. С. 4-5.
2. Гилязетдинов Э.М., Мохамед А. Ахмед, Хазиев Р.М., Штырлин Н.В., Исламов Д.Р., Бухаров М.С., Серов Н.Ю., Штырлин В.Г. *Сб. материалов XV Всероссийской молодежной научно-инновационной школы «Математика и математическое моделирование»* (Саров, 5-7 апреля 2022 г.). Саров, 2022. С. 145-146.
3. Shtyrlin N.V., Khaziev R.M., Shtyrlin V.G., Gilyazetdinov E.M., Agafonova M.A., Usachev K.S., Islamov D.R., Klimovitskii A.E., Vinogradova T.I., Dogonadze M.Z., Zabolotnykh N.V., Sokolovich E.G., Yablonskiy P.K., Shtyrlin Yu.G. // *Med. Chem. Res.* 2021. V. 30. N 4, P. 952-963.

РЕЦЕПТОРНЫЕ СВОЙСТВА ДИПЕПТИДА L-ЛЕЙЦИЛ-L-ЛЕЙЦИН

Ш.Р. Ахметшин

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

akshamil2251@gmail.com

Короткоцепные олигопептиды в настоящее время активно изучаются, благодаря своей способности к самосборке с образованием различных наноструктур и материалов. Материалы на основе олигопептидов биосовместимы и безопасны для окружающей среды, поэтому могут выступать в качестве хорошей альтернативы неорганическим наноматериалам. Кристаллы олигопептидов обладают большой сорбционной емкостью по сравнению с другими типами сорбентов, а в ряде случаев проявляют молекулярно-ситовой эффект. Благодаря этому они могут применяться для хранения и разделения газовых смесей, селективного связывания оптических изомеров и разделения рацемических смесей.

Вместе с тем, следует отметить, что многие свойства соединений этого класса на сегодняшний день находятся на начальной стадии изучения. Например, практически не изучены рецепторные свойства олигопептидов, реализующиеся в процессах взаимодействия «хозяин» - «гость» (host - guest). При этом следует отметить, что многие олигопептиды способны изменять свою кристаллическую упаковку под действием температуры и при взаимодействии с органическими молекулами. Данное свойство, характерное для супрамолекулярных рецепторов – каликсаренов, широко используется на практике при детектировании органических соединений, в том числе, и в многокомпонентных смесях.

В настоящей работе совмещенным методом термического анализа было проведено исследование рецепторных свойств дипептида L-лейцил-L-лейцин по отношению к парам органических соединений. Была обнаружена способность кристаллов дипептида L-лейцил-L-лейцин запоминать ранее связанные органические гости. Память рецептора проявляется в виде одного или нескольких тепловых эффектов на кривой ДСК в области температур выше температуры ухода связанных гостей. Обнаруженная способность дипептида может быть использована для детектирования органических соединений, как в индивидуальном состоянии, так и в многокомпонентных смесях.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭНТАЛЬПИИ СУБЛИМАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ

И.С. Балахонцев, М.И. Ягофаров

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

jsyoutub@gmail.com

Синтез и практическое применение лекарственных средств требуют знания термодинамических свойств индивидуальных соединений. Однако разброс доступных из литературы значений энтальпий сублимации достаточно велик, и это может затруднять использование этих данных на практике. Поскольку эти значения получены при разных температурах, их сопоставительный анализ затруднён. Поэтому выполняется пересчёт к стандартной температуре. Для такого расчёта требуются теплоемкости в кристаллической и газовой фазах для широкого диапазона температур. Данные по теплоемкостям доступны только для узкого круга хорошо изученных соединений, а экспериментальное определение или их расчет представляется трудоемкой задачей. В связи с этим были предложены различные эмпирические и теоретические методы расчета разности теплоемкостей кристаллической и газовой фаз. Самой известной является схема разработанная Чикосом и его коллегами [1]. Для расчета разности теплоемкостей используется линейная корреляция с теплоемкостью кристалла при 298,15 К. Эта модель имеет ряд недостатков, так, например, в ней не принимается в расчет температурная зависимость разности теплоемкостей, что значительно уменьшает предсказательную способность модели.

В этой работе нами предлагается альтернативный способ расчета энтальпий сублимации для ароматических соединений, не способных к специфическим взаимодействиям. Суть модели состоит в объединении ранее разработанных в нашей лаборатории методов расчёта разности теплоемкостей жидкой и газовой фаз для ароматических соединений [2], а также температурной зависимости энтальпии плавления [3]. Энтальпия сублимации в широком диапазоне температур рассчитывается как сумма энтальпии плавления и энтальпии испарения. Для определения энтальпии сублимации необходимы энтальпия растворения кристаллической фазы, энтальпия плавления, температура плавления и молекулярная структура. Для проверки достоверности модели были проанализированы 180 литературных значений энтальпий сублимации для 37 молекул и сопоставлены с рассчитанными значениями. Среднеквадратическое отклонение составило 1,4 кДж/моль.

Предложенный подход позволил получить надёжные, согласованные с другими термодинамическими величинами данные о температурной зависимости энтальпии сублимации. Эти данные, вместе с информацией о теплоемкостях кристаллической и идеальной газовой фаз, были использованы для разработки эмпирической схемы оценки разности теплоемкостей органических неэлектролитов в кристаллической и газовой фазах при различных температурах.

1. Chickos, James S, Hosseini, Sarah, Hesse, Donald G and Liebman, Joel F. Structural Chemistry, 1993, 4, 271-278.
2. Yagofarov, Mikhail I, Bolmatenkov, Dmitrii N and Solomonov, Boris N. The Journal of Chemical Thermodynamics, 2021, 158, 106443
3. Yagofarov, Mikhail I, Solomonov, Boris N., International Journal of Thermophysics, 2022, 43, 90.

ВОЗМОЖНОСТИ ДОЗИРОВАНИЯ ГАЗОВЫХ ПРОБ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МИКРОФЛЮИДНЫХ СИСТЕМ

А.И. Балашова, В.И. Платонов, И.А. Платонов, А.О. Балашов, Н.А. Афонин

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», Самара, Россия

balashova.ai@mail.ru

Для снижения стоимости и размеров хроматографов в конструкцию внедряются микрофлюидные аналитические системы, главное свойство которых миниатюризация. Микроклапаны позволяют контролировать поток подвижной фазы в микроканале путем изменения заданного значения макроскопического параметра [1].

Целью работы являлась разработка конструкции микрофлюидного дозатора, исследование его газодинамических свойств и определение его основных метрологических характеристик.

Эксперимент проводился на газовом микрохроматографе «ПИА», разработанного и изготовленного в Самарском университете. В качестве газохроматографической колонки использовалась микрохроматографическая колонка на плоскости сечения 1×1 мм и длиной канала 1 метр с адсорбентом – карбопак б. Детектор – термохимический проволочного типа. Объем петли дозатора – 250 мкл. Конструкция МЭМС-дозатора обеспечивает возможность программировать и обеспечивать дозирование объема пробы с дискретностью 0,1 секунда до момента насыщения 2,7 секунды и более.

В работе представлены результаты разработанной конструкции микрофлюидного клапана, мертвый объем спроектированного устройства составил 3,2 мкл., объем петли разработанного дозирующего устройства на основе изготовленного клапана - 250 мкл. Устройство позволяет программировать объем вводимой пробы в зависимости от времени ввода пробы в колонку до достижения времени ввода, равного 2,7 с.

1. Pilarski, P.M. Adamia S., Backhouse C.J An adaptable microvalving system for on-chip polymerase chain reactions [Текст] // J. Immunol. Methrology. – 2005. – № 305. – P. 48-58.

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ В ХИМИЧЕСКОМ ОБРАЗОВАНИИ

В.А. Безматерных, Р.Н. Сагитова

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

bezmaternykh.vlada@list.ru

В настоящее время в России, как и во всем мире, уделяется много внимания к развитию дистанционного образования и эффективному применению цифровых образовательных ресурсов при обучении в учебных заведениях разного уровня. Дистанционное обучение прочно закрепилось в современной системе образования. По этой причине в современном образовании наравне с традиционными формами обучения, также применяют элементы дистанционного обучения (ЦОР, онлайн-курсы и другие).

Цель данной работы - исследование эффективности онлайн-курсов и ЦОР в химическом образовании, выявить какие ЦОР или онлайн-курсы обучающийся завершают полностью. Суть работы заключается в анализе по критериям эффективности различных онлайн-курсов и ЦОР. Онлайн-курсы и ЦОР поделены по категориям, одни из них подходят обучающимся школ, другие для студентов университетов. В ходе работы был проведен анализ эффективности применения ЦОР и онлайн-курсов по следующим критериям: доступность (платные/бесплатные), методические материалы/методическая помощь (записи лекций, видеоуроков и д.р), форма контроля освоения онлайн-курса/ЦОР его участниками (тесты, зачеты), обратная связь и поддержка между разработчиками и участниками. Также определен процент обучающихся, завершающих ЦОР полностью.

В результате проведенной работы были выявлены их достоинства и недостатки, определен процент участников курсов, завершающих их полностью, а именно, что до конца проходят не более 15% слушателей онлайн-курсов. В ходе анализа выявлено, что из всех рассмотренных видов онлайн-курсов в основном полностью завершают онлайн-курсы, посвященные подготовке к ОГЭ и ЕГЭ. Наиболее большой процент завершения у ЦОР и онлайн-курсов, которые являются частью учебной программы.

1. Яшина Л.И., Горева О.М. Проблемы внедрения дистанционного обучения в вузе // Вестник Сургутского государственного университета. 2019. № 4. С. 84-90.
2. Haelermans Carla. "Digital tools in Education" 2017.

ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА: СИНТЕЗ И ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ

А.А. Бикмухаметов^а, О.С. Терентьева^а, П.Л. Падня^а, И.И. Стойков^{а,б}

^а КФУ, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

^б ФГБНУ Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности, Казань, Россия

azamat1.11.1@yandex.ru

В последние два десятилетия ионные жидкости (ИЖ) привлекают к себе огромное внимание исследователей вследствие их уникальных свойств: низкая токсичность и летучесть, высокая термическая стабильность, возможность вторичной переработки, высокая сольватирующая способность, полярность, электрохимическая устойчивость и электропроводность.

Аммониевые ИЖ имеют широкий спектр применения (экстракция ионов металлов, создание функциональных материалов и т.д.). Однако плохая биосовместимость, а также низкая селективность в комплексообразовании ограничивает их практическое применение. Одним из решений этой проблемы является модификация аммониевых ИЖ аминокислотными фрагментами. Известно, что ИЖ на основе природных аминокислот способны увеличивать стабильность биомакромолекул, таких как белки, ферменты и ДНК, при этом была также обнаружена их повышенная термическая устойчивость.

В данной работе были синтезированы макроциклические ионные жидкости на основе стереоизомеров *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, тетразамещенных по нижнему ободу четвертичными аммониевыми группами и аминокислотными фрагментами (глицин и *L*-фенилаланин), в конфигурациях *конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат*. С помощью термогравиметрического анализа было установлено, что все полученные макроциклические ИЖ термически стабильны вплоть до 305–327 °С. Впервые показано, что макроциклические ИЖ в конфигурации *частичный конус* обладают наименьшими температурами плавления. Полученные результаты могут быть использованы для создания сенсорных систем с возможностью распознавания целевых субстратов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 19-73-10134.

СИНТЕЗ НОВЫХ НЕСИММЕТРИЧНЫХ СОЛЕЙ БИС-ИМИДАЗОЛИЯ С ПОЛЯРНЫМИ ТРИАЗОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ

И.М. Богданов^а, В.А. Бурилов^а, Р.И. Гарипова^а, С.Е. Соловьева^{а,б}, И.С. Антипин^{а,б}

^а ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия

^б Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова, Казань, Россия

ilshat.bogdanov.2018@mail.ru

На сегодняшний день соли имидазолия нашли широкий спектр применения в современной науке. Столь большой интерес к данным соединениям вызван тем, что они обладают широким температурным диапазоном жидкого состояния, низкими температурами плавления, высокой электрической проводимостью, высокой растворяющей способностью, низкой летучестью и не токсичностью.

Также имидазолиевые соли являются превосходными лигандами для комплексов переходных металлов, имеющих большой потенциал применения в гомогенном и металлокомплексном катализе. В последнее время наибольшую популярность получили бис-ННС-комплексы, поскольку они обладают более высокой устойчивостью и каталитической активностью.

В данной работе сообщается о получении новых несимметричных солей бис-имидазолия, содержащих пространственно разделенные алкильные и азидные фрагменты. В подобные системы появляется возможность вводить разнообразные полярноалкильные субстраты путем реакции 1,3-диполярного азид-алкинового циклоприсоединения (схема 1).

Таким образом, полученные триазол-бис-ННС-содержащие производные будут обладать амфифильными свойствами, а комплексы переходных металлов на их основе могут обеспечить проведение каталитических превращений в водных средах.

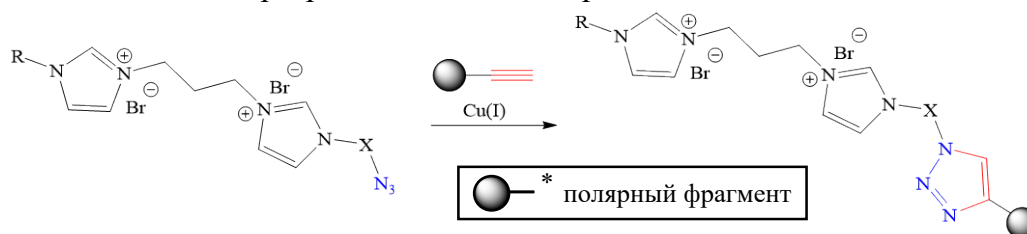


Схема 1.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-13-00304.

ВАРИАНТЫ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ИММУНОАНАЛИЗА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХЛОРАМФЕНИКОЛА И ДИКЛОФЕНАКА

Р.А. Борисова, А.А. Явишева, Я. Цибо, Р.М. Варламова, Э.П. Медянцева

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

Alsuyav@mail.ru

На сегодняшний день разработка экспрессных, специфичных, чувствительных методов анализа для определения лекарственных препаратов разных классов остается актуальной задачей. Одними из наиболее часто применяемых препаратов являются антибиотики, в частности хлорамфеникол, и лекарственные соединения нестероидного и противовоспалительного действия (НПВП), в частности диклофенак. Эти препараты часто используются в ветеринарии для лечения крупного рогатого скота. Хлорамфеникол - антибиотик широкого спектра действия, который подавляет эти бактерии и широко используется в молочном животноводстве и, следовательно, может содержаться в молочной продукции. Хлорамфеникол крайне токсичен и часто оставляет тяжёлые побочные эффекты при применении внутрь, а диклофенак имеет большой список нежелательных сопутствующих действий, такие как желудочно-кишечные расстройства, а также нарушения функции почек. По этим причинам содержание хлорамфеникола и диклофенака в лекарственных препаратах и пищевых продуктах следует строго контролировать. Тем самым обоснован интерес исследователей к разработке иммунохимических методов анализа, отвечающих вышеперечисленным требованиям. Одним из таких методов является поляризационный флуоресцентный иммуноанализ (ПФИА).

Для анализа был выбран вариант гомогенного конкурентного анализа ПФИА, в основе которого лежит конкурентное связывание искомого вещества и трэйсера (аналита, меченного флуоресцентной меткой) с ограниченным числом центров связывания специфических антител (Ат).

В качестве метки при разработке методики ПФИА использовали зеленый флуоресцентный комплекс тербия (III) и квантовые точки (КТ), которые оказались чувствительными для определения хлорамфеникола и диклофенака, соответственно.

Для обеспечения максимального значения аналитического сигнала были подобраны разведения трэйсера и антител. По результатам значений величины поляризации флуоресценции оптимальное разведение трэйсера составило 1:10, концентрация Ат – 4×10^{-2} и 1.6×10^{-4} мг/мл и для определения хлорамфеникола и диклофенака, соответственно.

Оптимальное время инкубации иммунного комплекса: трэйсер - антитела составило 5 мин. Линейный диапазон градуировочной зависимости поляризации флуоресценции от концентрации аналита для разработанных методик наблюдался в области концентраций 1×10^{-7} – 1×10^{-11} и 1×10^{-6} – 1×10^{-10} М для хлорамфеникола и диклофенака, соответственно.

Разработанные методики для определения диклофенака и хлорамфеникола апробированы в анализе пищевых продуктов (молоко). Погрешность определения не превышает 0.075.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА «Polyol process» ДЛЯ СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА В СРЕДЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛА

А.Е. Бурматова, А.А. Ханнанов, В.Г. Евтюгин, М.П. Кутырева

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

nastyaburmatova15@gmail.com

Метод полиольного синтеза (polyol process) [1] является одним из перспективных подходов к синтезу наночастиц металлов, который позволяет в одну стадию получать частицы с контролируемой формой и размерами. Традиционно в рамках polyol process используются линейные полиолы (этиленгликоль, пропиленгликоль, триметилэтиленгликоль, глицерин, углеводы и т.д.). Возможности сверхразветвлённых дендритоподобных полиолов, обладающих одновременно 3D архитектурой [2], обеспечивающей стабилизацию нанофазы и значимо большей концентрацией ОН групп как активных компонентов окислительно-восстановительной реакции практически не представлены в литературе. Предложена методика одностадийного синтеза наночастиц кобальта **CoNPs**, представляющая собой высокотемпературный синтез полимер-стабилизированных металлических наночастиц в матрице сверхразветвлённого полиэфирополиола четвертого поколения (PE-OH_{G4}), который выполняет роль и восстановителя, и стабилизатора одновременно. Установлено, что восстановление соединения-предшественника CoCl₂ полиолом PE-OH_{G4} происходит при 210 °С. Введение в реакционную смесь NaOH позволяет понизить температуру синтеза на 50 °С и приводит к смене механизма созревания **CoNPs in situ** с дигестивного для **CoNPs-1** на механизм прямого оставальдовского созревания для **CoNPs-2**. Анализ электронных спектров поглощения дисперсий **CoNPs** показал: частицы **CoNPs-1** представлены низкоразмерными кластерными интермедиатами ($\lambda_{\text{ППР}}=250$ нм) и наночастицами металлического кобальта ($\lambda_{\text{ППР}}=273$ нм), а также оксидной фазой Co₃O₄ ($\lambda_{\text{ППР}}=396$ нм); частицы **CoNPs-2** представлены наночастицами металлического Co⁰ ($\lambda_{\text{ППР}}=276$ нм) и оксидов кобальта ($\lambda_{\text{ППР}}=390$ нм). Наличие в ИК спектрах полосы при 1090 см⁻¹, отвечающей валентным колебаниям связи Co...O-H, указывает на стабилизацию наночастиц за счет периферических гидроксильных групп полиола PE-OH_{G4}. Уменьшение полосы при 1730 см⁻¹ указывает на дополнительную стабилизацию металлической фазы за счёт карбонильных групп сложноэфирного фрагмента полимера. Методом ПЭМ установлено (Рис.), что образец **CoNPs-1** представляет собой сферические полимер-композитные частицы с диаметром 35±10 нм, содержащие металлические нанокластеры кобальта с диаметром 5±2 нм в матрице полимера. Образец **CoNPs-2** имеет идентичную морфологию, диаметр частиц составил 50±10 нм, частиц металлической нанофазы - 7±3 нм.

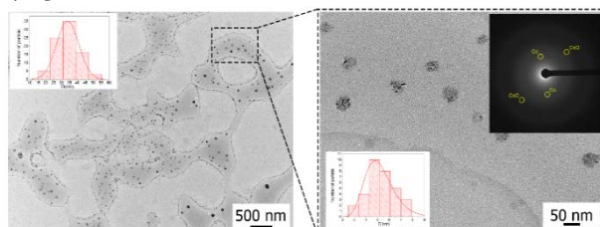


Рисунок 1 – ПЭМ-изображения, распределение наночастиц по размеру и электронная дифракция **CoNPs**.

Синтезированные полимеркомпозитные наночастицы кобальта **CoNPs** являются гемолитически неактивными (степень гемолиза не превышает 10%) и способны влиять на каталитическую активность аспарагиновой протеиназы *Aspergillus niger*, что делает их перспективными объектами для медицины и фармации.

1. Fievet F., Lagier J., Blin B., Beaudoin B., Figlarz M. // Solid State Ion. 1989. V. 32-33. P. 198-205.
2. Žagar E., Žigon M. // Prog. Polym. Sci. 2011. V. 36. № 1. P. 53-88.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СВЯЗУЮЩИХ И КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ

А.Э. Валеева, А.М. Зайцева, Б.Р. Таишев, К.А. Андрианова

*Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ,
Казань, Россия*

alsuvaleeva8@yandex.ru

При создании композиционных материалов для авиастроения наиболее широко используются матрицы на основе органических полимеров, недостатками которых является низкая термостойкость и устойчивостью к окислению, а также высокая горючесть. В настоящее время актуальным направлением является разработка высокотемпературных жаростойких композиционных материалов на основе неорганических связующих для производства изделий, эксплуатирующихся при высоких температурах. Преимуществом неорганических матриц является высокая прочность на сжатие, огнеупорность и устойчивость к воздействию кислот, а также экологичность, чем они выгодно отличаются от связующих на основе термореактивных полимеров.

Целью данной работы было исследование свойств ряда неорганических композиций для получения композиционных материалов на их основе. В качестве неорганических связующих были использованы алюмофосфатные составы (алюмофосфат, аломохромфосфат, аломоборфосфат) и алюмосиликаты, синтезированные на основе цеолита и раствора NaOH.

Изучение реологических свойств связующих является важным этапом в оптимизации технологических процессов производства композитов. Измерения реологических свойств проводились на ротационном реометре DHR2 (фирма «TA Instruments» (США)) с рабочим узлом типа «плоскость – плоскость» в режиме вращения и осцилляции. Термогравиметрический анализ проводили выдержкой в печи при различных температурах и скоростях нагрева с последующим взвешиванием. Плотность составов в зависимости от температуры определялась пикнометрически в интервале от 0 до 90°C. Исходя из полученных данных, были определены оптимальные режимы пропитки и отверждения неорганических связующих и разработана технология получения композиционного материала методом контактного формования. Механические испытания показали, что полученные углепластики характеризуются высокими значениями модуля упругости и прочности при растяжении и сдвиге.

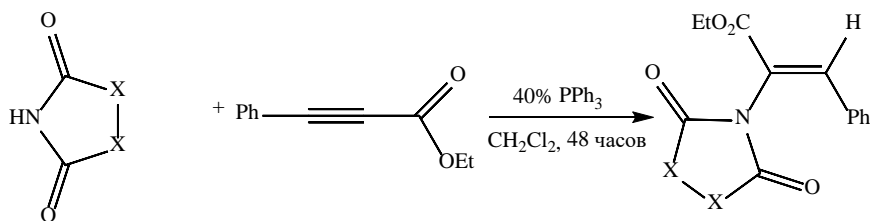
ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ α -ЗАМЕЩЕННЫХ ЦИННАМАТОВ

В.А. Варанкина, А.В. Ильин

*Казанский (Приволжский) Федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

Viktoriyavarankina2309@mail.ru

В последнее время все большее количество исследований направлено на изучение свойств веществ, встречающихся в природных источниках. Одними из таких соединений являются циннаматы – это эфиры коричной кислоты, которые находят свое применение в различных областях.[1,2] Еще одним активно исследуемым классом соединений со множеством практически полезных свойств являются гетероциклические соединения азота.[3,4] В связи с чем получение новых α -имидоциннаматов является довольно интересной задачей. Нами были оптимизированы условия получения α -замещенных циннаматов по реакции этилового эфира фенилпропиоловой кислоты с замещенными гидантоинами и некоторыми имидами. Реакции протекали, при 40 мольных % трифенилфосфина за 48 часов. Для всех соединений удалось вырастить кристаллы пригодные для рентгеноструктурного анализа. По данным РСА подтверждается, что продукт α -присоединения, где гетероциклический фрагмент находится в цис положении к фенильной группе.



1. J. S. Puelles, M. Ghorbani, S. Crawford, M. L. Ackland, F. Chen, M. Forsyth, A. E. Somers // Journal of Colloid and Interface Science. – **2022**, № 610 – P. 785-795.
2. T. Saritas, V.G. Puelles, X.T. Su, D.H. Ellison, R. J. Kramann // Journal of Visualized Experiments. – **2019**. – P. 1-9.
3. N. Bunbamrung, et al. // Phytochemistry Letters, – **2015**, № 12. – P. 142-147.
4. M. Nakajima et al //The Journal of antibiotics. – **1991**, №. 3. – P. 293-300.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА НА ОДНОАТОМНЫХ УГЛЕРОДНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ, ДОПИРОВАННЫХ АЗОТОМ И МЕТАЛЛАМИ

К.Ю. Виноградов, Р.В. Шафигулин, А.В. Буланова

*«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева»
(Самарский университет), Самара, Россия*

winyur@yandex.ru

В работе методами квантово-химического моделирования были изучены каталитические свойства углеродных материалов, допированных четырьмя атомами азота и атомом металла: кобальта, меди, никеля, марганца, цинка или хрома. Расчеты проводили с использованием программы Gaussian 09. Моделирование осуществляли методом теории функционала плотности (DFT) с использованием функционала b3lyp и базиса 6-31G*. В качестве рассматриваемой реакции был выбран ассоциативный механизм как преобладающий для моделируемого типа активных центров. Энергии конечных веществ были приняты за нулевой уровень.



Рисунок 1 – Структура модельного катализатора. Серые сферы – углерод, синие – азот, белые – водород, зелёный – исследуемый металл (а); Энергетический профиль ORR на модельных катализаторах: CoN₄-серый; CuN₄-черный; NiN₄-синий; MnN₄-красный; ZnN₄-темно-красный; Cr(OH)N₄-зеленый. Идеальный катализатор - темно-синий (b).

Характеристики, наиболее близкие к идеальным, проявили катализаторы, содержащие кобальт и хром, показав перенапряжение 0,52 В и 0,56 В соответственно. Это делает материалы на основе фталоцианинов и порфиринов кобальта и хрома наиболее перспективными для практического изучения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и рамочной программы БРИКС в рамках научного проекта № 19-53-80033.

СИНТЕЗ, СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ 2-АРИЛМЕТИЛИДЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛО[3,2-А]ПИРИМИДИНА

Э.Р. Габитова^a, А.С. Агарков^{a,b}, А.А. Нефедова^b, А.Р. Муртазин^a, А.С. Овсянников^b,
И.А. Литвинов^b, А.Д. Волошина^b, С.Е. Соловьева^b, И.С. Антипин^a

^a Казанский федеральный университет, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

EliRGabitova@stud.kpfu.ru

Пиримидин и конденсированный тиазоло[3,2-*a*]пиримидин являются важными гетероциклическими соединениями, которые проявляют многообещающую фармакологическую активность, то есть противоопухолевую, антиоксидантную, противомикробную, противотуберкулезную и т.д. [1]. Данная работа посвящена синтезу, изучению супрамолекулярных мотивов в кристаллической фазе, а так же биологических активности производных 2-арилметилендиэтилокси-тиазоло[3,2-*a*]пиримидина на примере цитотоксичности [2,3].

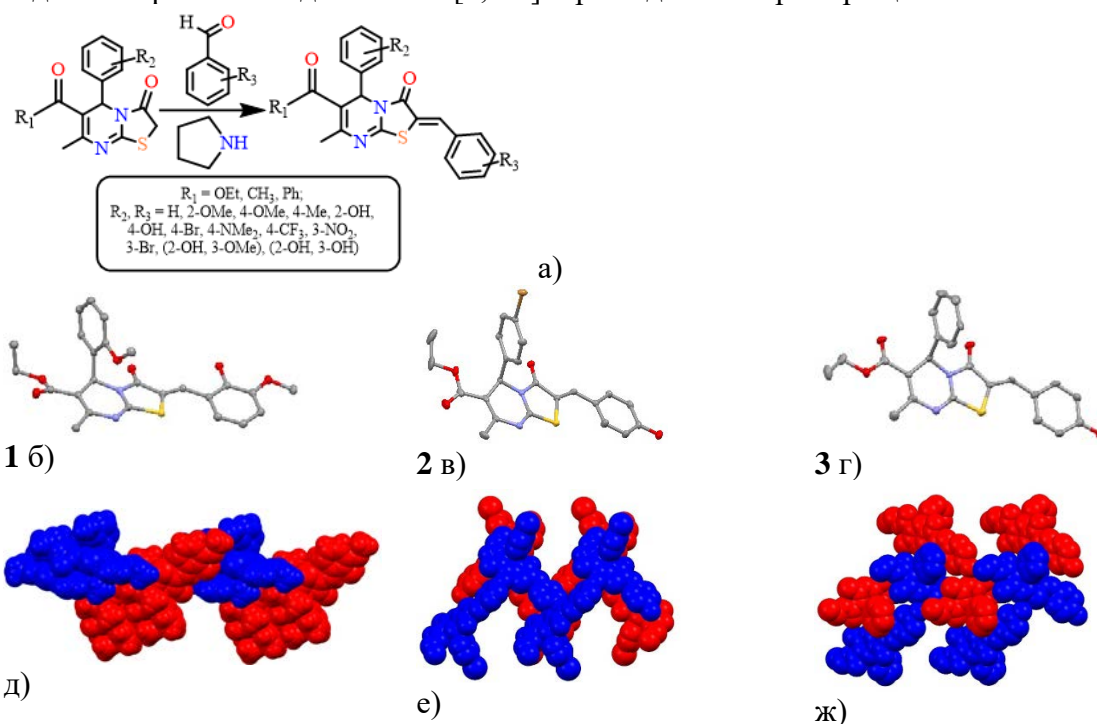


Рисунок 1 – а) схема синтеза 2-арилметиленовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина; б), в) и г) геометрия соединений **1**, **2** и **3** в кристалле, соответственно; д), е) и ж) супрамолекулярная организация в кристаллической фазе соединений **1**, **2** и **3**, соответственно. Красным и синим цветом *S*- и *R*-изомеры, соответственно.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной ФИЦ КазНЦ РАН для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

1. El-Shahat, M., Salama, M., et al. *Mini-Rev. Med. Chem.*, **2021**, 21(1), 118-131.
2. Agarkov A. S., Gabitova E. R. et al. *Crystals*, **2022**, 12, 494.
3. Agarkov A. S., Nefedova A.A., Gabitova E. R. et al. *Molecules*, **2022**, 27(22), 7747.

ПОЛЯРИЗАЦИОННОЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЕ ИММУНОХИМИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИКЛОФЕНАКА В ВОДНЫХ ОБЪЕКТАХ

Э.Р. Газизуллина^a, Д.В. Брусницын^a, А.Н. Рамазанова^a, Э.П. Медянцева^a,
О.А. Махмудова^b, В.Н. Хазиахметова^b, С.В. Федоренко^c, А.Р. Мустафина^c, С.А. Еремин^d

^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^b Институт фундаментальной медицины и биологии КФУ, Казань, Россия

^c Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ КНЦ РАН, Казань,
Россия

^d Химический факультет МГУ, Москва, Россия

elvina1704@yandex.ru

Современные тенденции развития иммунохимических методов анализа требуют простых экспрессных методик при определении лекарственных препаратов в различных объектах. Особое внимание заслуживает поляризационный флуоресцентный иммунохимический анализ (ПФИА). В качестве аналитического сигнала в ПФИА используется изменение поляризации флуоресценции.

Необходимо отметить ненадлежащую утилизацию фармацевтических препаратов человеком, что приводит к загрязнению водных объектов лекарственными соединениями, которые в дальнейшем попадают обратно в организм человека с водой. В связи с этим необходимо проведение мониторинга поверхностных вод.

Нестероидные противовоспалительные препараты с анальгезирующим действием, в частности диклофенак, широко используются для лечения воспалительных процессов, ревматизма и дегенеративных изменений в органах и тканях.

Аналитические возможности определения диклофенака методом ПФИА показывают, что линейный участок с высокой чувствительностью наблюдается в интервале от 3×10^{-5} до 3×10^{-10} моль/л.

В ходе сопоставления полученных результатов при определении диклофенака методом ПФИА и амперометрическим иммуносенсором установлено, что результаты равноточны и вклад систематической погрешности не значим.

Разработана методика определения диклофенака методом ПФИА в поверхностных водах озера Нижний Кабан (относительное стандартное отклонение не более 0.090), рек Казанка (относительное стандартное отклонение не более 0.085) и Волга ((пляж Локомотив) относительное стандартное отклонение не более 0.080).

ТЕХНОЛОГИЯ РАЗВИТИЯ КРИТИЧЕСКОГО МЫШЛЕНИЯ В РАМКАХ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ

Г.А. Саттарова, С.С. Космодемьянская

Химический институт им. А.М. Бутлерова К(П)ФУ, Казань, Россия

mysun.themoon7@gmail.com

Модернизированное обучение побудило современную систему образования сделать шаг вперед – применять существующие и обновленные технологий учения в образовательном процессе. Критическое мышление можно связать с навыком «гибкого» мышления, которое способствует адаптации к новым методам образовательного процесса.

Критическое мышление и дистанционное обучение – два наиболее выдающихся элемента, основанных в современной глобализированной образовательной среде. Реализуя концепцию критического мышления в условиях цифровизации, от обучающихся ожидается, что они свяжут свое мышление и идеи с контекстуальными жизненными аспектами. Таким образом, ученики приобретают концепцию мыслить критически, действовать и решать проблему, рассматривая факторы, существующие вокруг них.

По результатам проделанных работ пришли к выводу, что критическое мышление помогает обучающимся определить свои собственные приоритеты в жизни, повышает уровень индивидуальной работы с информацией, формирует умение анализировать и делать самостоятельные выводы, прогнозировать последствия своих решений и нести за них ответственность. На сегодняшний день по исследуемой проблеме обрабатываются данные для выпускной квалификационной работы.

1. Заир-Бек С.И. Развитие критического мышления на уроке: пособие для учителей общеобразоват. учреждений. / С.И. Заир-Бек, И.В. Муштавинская. – 2-е изд., дораб. – М.: Просвещение, 2011. – 223 с
2. Урусова М.А. Дистанционное обучение: задачи и реализации / М.А. Урусова // Культура, искусство, образование: история и современность: сборник методических рекомендаций. – Ульяновск: Качалин Александр Васильевич, 2021. – С. 305-307.

СОСТОЯНИЕ ЭЛЕМЕНТНОЙ СЕРЫ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НЕКОТОРЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ И МИЦЕЛЛООБРАЗУЮЩИХ ПАВ

Э.Т. Гайфуллина, Э.И. Галимова, А.Б. Зиятдинова, Р.Р. Заиров, Р.Р. Амиров

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

annette_zb@mail.ru

Сера – биологически важный элемент, широко распространенный в природе. Элементарная сера является интермедиатом во многих биогеохимических циклах. Благодаря антибактериальной активности сера широко применяется при лечении дерматологических заболеваний и болезней растений. Кроме того, сера используется при производстве катализаторов, аккумуляторных батарей, разнообразных полимерных материалов. Одной из перспективных областей применения является использование наноразмерных частиц серы в качестве антимикробных добавок в биополимерных пленках для упаковки и хранения продуктов питания. Однако высокая гидрофобность и нестабильность наночастиц ограничивает использование серы для изготовления подобных композитных материалов с воспроизводимыми физико-химическими параметрами в промышленных масштабах. В связи с этим получение стабильных эмульсий наноразмерных частиц серы является актуальной задачей.

В данной работе в качестве реакции получения серы было использовано взаимодействие тиосульфата натрия с серной кислотой. Все исходные растворы были прозрачные, тиосульфат натрия добавляли в последнюю очередь. При сливании реагентов наблюдалось помутнение раствора с образованием светло-желтого осадка. Для стабилизации эмульсии был использован ряд мицеллообразующих ПАВ различной природы: анионные (додецилсульфат натрия), катионные (бромиды додецилпиридия, алкилтриметиламмония с цепями C₁₂-C₁₆), неионные (оксиэтилированные спирты Brij35 и TX100). Установлено, что присутствие ПАВ не дает стабильных эмульсий, но меняет цвет и морфологию осадка.

При использовании полиэлектролитов в качестве стабилизирующих добавок в случае поливинилпирролидона была получена наиболее устойчивая эмульсия. Анализ порядка сливания растворов показал, что стабильность эмульсии максимальна и достигает 24 ч при добавлении в последнюю очередь тиосульфата.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030») и грантов РНФ 21-13-00115, 22-13-00010.

РАЗРАБОТКА ОГНЕСТОЙКОГО ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ ГЛИЦИДИЛОВОГО ЭФИРА КИСЛОТ ФОСФОРА (ГЭФ)

А.М. Гайфутдинов^{a,b}, К.С. Зимин^{a,b}, Р.Р. Низамиев^a, Л.М. Амирова^a, К.А. Андрианова^a

^a *Институт авиации, наземного транспорта и энергетики КНИТУ-КАИ, Казань, Россия*

^b *Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*

amir_gaifutinov@mail.ru

Полимерные композиционные материалы (ПКМ) широко используются в различных областях, при производстве изделий авиационной техники. Горючесть ограничивает их применение, поэтому пожарная безопасность является актуальной проблемой для композиционных материалов. Существуют различные методы повышения огнестойкости материалов добавлением в полимер: галогенсодержащих антипиренов; фосфорсодержащих антипиренов; бор-, азот, кремнийсодержащих соединений; металлоорганических соединений; наполнителей из наночастиц. Наиболее перспективными являются фосфорсодержащие антипирены, они встраиваются в сетку полимера и проявляют высокую огнестойкость [1].

Целью работы была разработка состава пониженной горючести на основе низковязкого фосфорсодержащего эпоксидного олигомера для трансферных методов формования ПКМ. Объектами исследования были выбраны: эпоксиноволачная смола D.E.R.354, глицидилэфир кислот фосфора – триглицидилфосфат (ТГФТ), высокотемпературный отвердитель марки D.E.H.650, наполнитель – углеродная ткань марки АСМ С200Р. Системы исследовали методами дифференциальной сканирующей калориметрии, реометрии, динамического механического анализа и установки для исследования горючести.

В ходе данной работы разработан состав огнестойкого связующего на основе эпоксидной смолы, модифицированной фосфорсодержащими соединениями. Исследованы процесс отверждения и свойства разработанной композиции: горючесть, реологические свойства, модуль упругости и температура стеклования. Определены физико-механические свойства углепластика на основе предложенного состава связующего.

1. Gaifutdinov, A. M., Andrianova K. A., Amirova L. M., Milyukov V. A., Zagidullin A. A., and Amirov R. R. "Promising low-viscosity phosphorus-containing epoxy compounds: Features of interaction with aromatic amines." *Results in Engineering* 14 (2022): 100421.

НАСТАВНИЧЕСТВО КАК ТЕХНОЛОГИЯ, ОРИЕНТИРОВАННАЯ НА МАКСИМАЛЬНУЮ ИНДИВИДУАЛИЗАЦИЮ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА В ОБУЧЕНИИ ХИМИИ

Я.М. Галимуллина, И.Д. Низамов

Химический институт им. А. М. Бутлерова, К(П)ФУ, Казань, Россия

sam_vm@bk.ru

В качестве факторов, составляющих предпосылку для наиболее полной социализации личности ребенка, применяются множество различных методов обучения, ориентированные на максимальную индивидуализацию учебного процесса. Одна из наиболее эффективных технологий – наставничество. Наставничество – это сложный интерактивный процесс, который происходит между людьми с разным уровнем опыта и знаний, в котором эксперт (наставник) оказывает поддержку своему подопечному, чтобы стать более эффективным в работе и способствовать достижению целей учреждения, в котором он работает [1]. Для данной методики необходим систематический подход к осуществлению максимальной индивидуализации учебного процесса в обучении химии, который включает в себя усовершенствованные рефлексивные механизмы, диагностику полученного уровня и коррекцию на основе допущенных ошибок и просчетов. Следовательно, современный молодой учитель должен уметь быстро реагировать на изменения в образовательной среде с учетом специфики современных педагогических систем, а также достаточно быстро адаптироваться к новым условиям профессиональной деятельности для реализации личностного потенциала его подопечного [2].

1. Галимуллина Я. М. Деятельность учителей наставников при подготовке будущих учителей, работающих с одаренными обучающимися / Я. М. Галимуллина, Ф. Д. Халикова // *Advances in Science and Technology: Сборник статей XLV международной научно-практической конференции*. Москва, 2022 / «Научно-издательский центр «Актуальность. РФ». – Москва, 2022. – С.187-189.
2. Сабирова А. Р. Индивидуальный поход на уроках химии / А. Р. Сабирова, И. Д. Низамов // *Концепции современного образования: системные изменения и перспективные направления развития: Сборник научных трудов*. – Казань, 2020. – С.158-161.

ТЕРПЕН-ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНЫ КАК МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ АМФИФИЛЫ: СИНТЕЗ И МЕМБРАНОТРОПНАЯ АКТИВНОСТЬ

Р.Р. Гамиров^a, А.А. Ахмедов^a, Д.Н. Шурпик^a, И.И. Стойков^{a,b}

^a КФУ, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

^b ФГБНУ Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности,
Казань, Россия

gamirov_21@mail.ru

Актуальной проблемой создания лекарственных препаратов на основе органических соединений является их низкая растворимость в воде. Для решения этой проблемы все чаще используются комбинированные подходы супрамолекулярной и медицинской химии. Так, макроциклические амфифилы, способные к образованию комплексов типа гость-хозяин с терапевтическими агентами, являются перспективной платформой для создания систем инкапсулирования препаратов.

Пиллар[n]арены представляют собой перспективный строительный блок для синтеза макроциклических амфифилов. Одним из подходов к созданию целевых соединений является функционализация платформы пиллар[5]арена природными, нетоксичными липофильными фрагментами терпеноидов. Введение терпеноидных фрагментов позволит увеличить биосовместимость и биodeградируемость конечных веществ.

В качестве липофильных терпеновых фрагментов в макроцикл были введены десять геранильных или фарнезильных фрагментов. Структура полученных соединений охарактеризована комплексом физических методов. Методом ДРС и ПЭМ была оценена способность полученных соединений образовывать самоассоциаты путём самосборки в водных растворах. Было установлено, что в водной среде образуются наноразмерные агрегаты синтезированных макроциклов с диаметром 98-180 нм (PDI 0.18-0.23), которые сохраняют свою сферическую форму в диапазоне концентраций от $(1 \times 10^{-4} \text{ М до } 1 \times 10^{-6} \text{ М})$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-73-00187) и за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

МЕХАНИЗМ ИНГИБИРОВАНИЯ НИТРОКСИЛЬНЫМ РАДИКАЛОМ В ПРИСУТСТВИИ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ И α - НАФТИЛАМИНА

Г.Г. Гарифуллина, Р.Н. Насретдинова

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Garifa@inbox.ru

Нитроксильные радикалы нашли широкое применение в качестве ингибиторов для предотвращения полимеризации мономеров на стадии их очистки и хранения. Представляет практический интерес возможность удлинения срока действия ингибирующих свойств нитроксильных радикалов за счет их регенерация в реакциях обрыва цепей и синергического эффекта совместного действия.

Исследовано влияние стабильного нитроксильного радикала 2,2,6,6 –тетраметил-4-ацетиламинопиперидин-N-оксил на окисление пропан-2-ола. Окисление пропан-2-ола проводили при температуре 75°C в присутствии классического инициатора азодиизобутиронитрила (АИБН). За кинетикой реакции следили по поглощению кислорода на дифференциальной манометрической установке. Установлено, что нитроксильный радикал расходуется только в присутствии инициатора окисления.

В отсутствие ингибирующих добавок кинетическая кривая поглощения кислорода пропанолом имеет линейный вид. Добавки в систему нитроксильного радикала приводят к появлению четкого периода индукции на кинетических кривых поглощения кислорода. Величина периода индукции линейно зависит от концентрации добавленного ингибитора. В присутствии добавок уксусной кислоты в окисляющийся спирт величина периода торможения нитроксильным радикалом резко возрастает и составляет больше 3-х часов. Спектрофотометрически было показано, что добавки уксусной кислоты снижают скорость расходования нитроксильного радикала в 80 раз. Наиболее вероятной причиной снижения скорости расходования нитроксильного радикала и как следствие увеличение периода торможения процесса окисления спирта является реакция их регенерации в стадиях обрыва цепей в кислой среде.

Совместные добавки нитроксильного радикала и α - нафтиламина приводит к увеличению периода индукции в реакции окисления пропанола в 5 раз - проявляется эффект синергизма для действия двух ингибиторов окисления.

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ЛИСТОВ ОКСИДА ГРАФЕНА НА ИЗНОСОСТОЙКОСТЬ ЭПОКСИДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ

Р.М. Гатаулина, М.И. Спиридонова, Д.К. Роженцова

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

ramigataullina1999@gmail.com

Благодаря уникальной прочности, тепло-, и электропроводящим свойствам 1D и 2D углеродные наноматериалы имеют большие перспективы для инноваций в области материаловедения. Однако для того, чтобы свойства отдельных наноструктур были преобразованы в свойства единого макроскопического материала, необходимо ориентировать их в одном направлении. Поэтому ориентационный контроль (механический или с помощью электрических или магнитных полей) и сборка множества листов графена (ОГ) или одностенных углеродных нанотрубок (УНТ), является неотъемлемой частью получения новых материалов с уникальными свойствами.

Подход с использованием магнитного поля более удобен для получения массивных изделий, например, для получения анизотропных нанокomпозитов. Несмотря на доступность ОГ в отличие от графена для получения композиционных материалов, к сожалению, ОГ не проявляет высоких магнитных свойств, что не позволяет его использовать в чистом виде для получения анизотропных композитов.

Предложена простая стратегия для получения магнитно-чувствительного ОГ, с усилением его магнитных свойств путем легирования суперпарамагнитными наночастицами оксидов железа. На основе полученного магниточувствительного ОГ были получены образцы эпоксидных нанокomпозитов с различными ориентациями листов ОГ в материале. Анализ износостойкости этих материалов показали разные значения коэффициента трения и устойчивость к износу. Наиболее подверженным к износу оказались образцы эпоксидных нанокomпозитов, в которых ориентация листов ОГ была параллельна плоскости испытания. Наименее подвержены износу образцы с перпендикулярной ориентацией листов ОГ к плоскости испытания.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 22-23-00348).

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО-ИНЖЕКЦИОННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ В СЛЮНЕ ГЛЮКОЗЫ, ИНСУЛИНА И МОЧЕВОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ ЗОЛОТО-КОБАЛЬТ

И.А. Гафиатова, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

ilvina1603@mail.ru

В последние годы последовательный инжекционный анализ (ПослИА) все чаще используют для определения маркеров заболеваний в биологических жидкостях человека благодаря низкому пределу обнаружения, высокой селективности и производительности. Определение глюкозы, инсулина и мочевой кислоты (МК) в биологических жидкостях человека особенно важно для ранней диагностики диабета и сопутствующих ему патологий, таких как эндокринные, ревматические заболевания (подагра), заболевания почек и подбора оптимальных доз лекарственных препаратов.

В настоящей работе была изучена каталитическая активность частиц кобальта, золота и бинарной системы на их основе (Au-Co), электроосажденных на поверхности углеродных планарных электродов с одним (ПЭ) и двумя рабочими электродами (ДПЭ), при окислении глюкозы, инсулина и МК в условиях вольтамперометрии и ПослИА.

Установлена каталитическая активность частиц кобальта, золота и бинарной системы Au-Co электроосажденных на поверхность ПЭ проявляют по отношению к рассматриваемым соединениям. Каталитические свойства в большей степени проявляются на ПЭ с иммобилизованной бинарной системой Au-Co, что отражается в увеличении каталитического тока и в более широком диапазоне линейной зависимости тока от концентрации рассматриваемых органических соединений.

Предложен селективный способ одновременного глюкозы, инсулина и МК при совместном присутствии с помощью последовательной инжекционной системы, схема которой включала два детектора: один на основе ПЭ для определения глюкозы, другой – на основе ДПЭ для определения инсулина и МК. Поверхность рабочих электродов ПЭ и ДПЭ модифицировали бинарной системой Au-Co. Предварительно для каждого соединения определены электрохимические и гидродинамические условия регистрации аналитического сигнала на его величину. Производительность при использовании модифицированных ПЭ и ДПЭ в последовательной инжекционной системе составила 540 определений/час.

Полученные результаты были использованы при анализе слюны. Установлено, что присутствие матричных компонентов не мешает определению глюкозы, инсулина и МК, так они либо не окисляются в выбранных условиях, либо окисляются, но в другой области потенциалов. В присутствии этих соединений наблюдается хорошая сходимост результатов определения БАС ($s_r < 5\%$).

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

РАЗРАБОТКА ИНСТРУМЕНТА ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ПУТИ СИНТЕЗА ХИМИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ И ЕГО АНАЛОГОВ НА ОСНОВЕ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

А.Д. Гильмуллин^а, А.А. Фатыхова^а, Д.В. Занков^а, Т.И. Маджидов^а, А. Варнек^б

^а *Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

^б *Университет Страсбурга, Страсбург, Франция*

almaz.ggilmullin@gmail.com

В данной работе мы представляем алгоритм для планирования синтеза химических соединений, позволяющий предсказать путь синтеза не только целевой молекулы, но и ее аналогов.

Одним из важнейших составляющих инструмента является виртуальный реактор, который кодирует путь синтеза молекулы в виде списка целых чисел - набора действий для виртуального реактора. Его особенность в том, что он проводит трансформацию с молекулами и создает химически валидные соединения с учетом правил валентности. Длина списка соответствует количеству стадий синтеза, а каждое число означает определенное действие, к примеру восстановление определенной функциональной группы или добавление нового реагента.

Для эффективного поиска лучшего решения в данной работе мы использовали генетический алгоритм, который позволяет оптимизировать целевую функцию по отношению к списку чисел, поступающей на вход виртуального реактора. В данном случае популяция представляет собой совокупность особей, имеющих по одной хромосоме, соответствующий путь синтеза. А хромосомой является набор генов, каждый из которых представляет собой действие. Таким образом, генетический алгоритм генерирует список последовательностей действий, которые необходимо осуществить, чтобы синтезировать целевую молекулу при этом оптимизируя определенную целевую характеристику, в нашем случае индекс Танимото, коэффициент сходства целевой молекулы и молекулы, который был сгенерирован алгоритмом.

Для улучшения алгоритма был внедрен метод глубокого обучения, в котором модель обучалась на лучших особях популяций, созданных генетическим алгоритмом для предсказания пути синтеза одного заданного соединения.

ЦВИТТЕР-ИОННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ – СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА В КАЧЕСТВЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОСИСТЕМ

З.Р. Гильмуллина^а, Ю.Э. Морозова^б, В.А. Соловьева^а, А.П. Любина^б, С.К. Амерханова^а,
А.Д. Волошина^б, И.С. Антипин^а

^а Химический институт им. А. М. Бутлерова, Казань, Россия

^б ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

zukhra120900@gmail.com

Цвиттер-ионные соединения встречаются во многих биологических системах и выполняют самые разные функции, будь то регулирование осмотического давления или модификация клеточных поверхностей. При этом благодаря высокой гидрофильности синтетические цвиттер-ионные соединения проявляют низкую цитотоксичность, что способствует их использованию в терапевтических наносистемах. На сегодняшний день амфифильные макроциклы, в частности, каликсрезорцины представляют интерес как потенциальные системы доставки лекарственных препаратов и терапевтических агентов. Поскольку многие из лекарств характеризуются гидрофобной природой, применение амфифильных соединений способствует их солубилизации и позволяет увеличить время циркуляции активного вещества в организме. При этом использование наноконтейнера с поверхностью, декорированной цвиттер-ионными фрагментами, сможет снизить опасность проявления нежелательных побочных эффектов в случае высокой токсичности препарата.

Целью нашей работы было введение цвиттер-ионных фрагментов в структуру каликсрезорцинов и исследование их самоассоциации и взаимодействия с биологически активными соединениями. Нами получены тетраундецил-, тетрапентил- и тетрадодецилоксифенилкаликс[4]резорцины, функционализированные по верхнему ободу карбоксибетаиновыми и сульфобетаиновыми фрагментами. Синтезированные соединения охарактеризованы методами ¹H и ¹³C ЯМР, ИК - спектроскопии, ESI масс-спектрометрии и элементным анализом. Показана зависимость величин ККА макроциклов от структуры их гидрофобных и цвиттер-ионных заместителей и состава растворов. Получены параметры комплексообразования карбоксибетаиновых производных с модельным белком БСА. Найдена способность самоассоциатов цвиттер-ионных макроциклов стабилизировать анионный флуоресцентный краситель. Изучена *in vitro* биологическая активность синтезированных макроциклов. Полученные данные демонстрируют потенциал изученных макроциклов в создании терапевтических наносистем.

СЕЛЕКТИВНЫЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ ОДНОВРЕМЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПИЩЕВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

Л.Т. Гимадудинова, Г.К. Зиятдинова

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

liliya.gimadutdinova@gmail.com

Синтетические красители активно используются в пищевой промышленности, но оказывают негативное воздействие на здоровье человека при высоких концентрациях. Поэтому необходим строгий контроль их содержания в продуктах питания. Среди большого разнообразия синтетических пищевых красителей представляют интерес тартразин и синий блестящий FCF, которые часто применяют совместно. Оба красителя электроактивны, однако в литературе описаны лишь единичные примеры их одновременного вольтамперометрического определения.

Разработан новый вольтамперометрический сенсор на основе нанострежней диоксида марганца, диспергированных в цетилпиридиний бромиде, для одновременного определения тартразина и синего блестящего FCF. Модифицированный электрод охарактеризован методами сканирующей электронной микроскопии, циклической вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса. Полученные данные подтверждают эффективность предложенного модификатора электродной поверхности.

Найдены параметры электроокисления синего блестящего FCF и татразина на модифицированном электроде. Оба красителя окисляются необратимо с участием двух электронов. Для тартразина процесс сопровождается переносом протонов и контролируется поверхностными процессами. Электроокисление синего блестящего FCF контролируется диффузией.

В дифференциально-импульсном режиме в среде фосфатного буферного раствора pH 7.0 отклик сенсора линеен в диапазонах 0.10–2.5 и 2.5–15 мкМ татразина и 0.25–2.5 и 2.5–15 мкМ синего блестящего FCF с пределами обнаружения 41 и 43 нМ соответственно. Показана высокая селективность сенсора на целевые красители, в том числе в присутствии других пищевых красителей, что является основным преимуществом предложенного подхода. Сенсор апробирован на безалкогольных и изотонических спортивных напитках.

ДНК-СЕНСОР НА ОСНОВЕ ПОЛИТИОНИНА ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННОГО ИЗ ГЛУБОКОГО ЭВТЕКТИЧЕСКОГО РАСТВОРИТЕЛЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭПИРУБИЦИНА

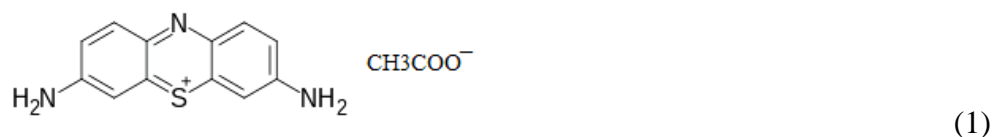
А.И. Гойда, А.В. Порфирьева, Г.А. Евтюгин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

a.goida@mail.ru

Биосенсоры обладают широкими перспективами использования для анализа биологически активных соединений, лекарственных препаратов, токсикантов, биомаркеров заболеваний. Использование новых материалов в составе биосенсоров позволяет расширить круг определяемых соединений, снизить предел определения аналитов, повысить чувствительность и селективность анализа. Активная разработка простых и доступных биосенсоров позволяет внедрять такие устройства в практику медиков, экологов, ветеринаров, работников пищевой промышленности. В ДНК-сенсорах в качестве биораспознающего элемента выступают молекулы ДНК из различных источников. Они способны к высокоспецифичному взаимодействию с белками, лекарственными препаратами, например, антибиотиками и цитостатиками.

Нами впервые изучена электрополимеризация на подложке из печатного графитового электрода и оценены электрохимические параметры покрытия на основе фенотиазинового красителя тионина (1) из среды глубокого эвтектического растворителя (ГЭР) на основе глюкозы, воды и моногидрата лимонной кислоты.



Компоненты ГЭР смешивали в молярном соотношении 1:1:5 (глюкоза : моногидрат лимонной кислоты : вода) и подвергали ультразвуковой обработке в течение 30 мин. Концентрация тионина в среде для электрополимеризации составляла 0.1 М. На рабочую поверхность печатного графитового электрода на поликарбонатной основе капельно наносили 100 мкл ГЭР, содержащего 0.1 М тионин. Установлено, что на вольтамперограммах, полученных для политионина из среды ГЭР лучше выражены и разрешены как катодные, так и анодные сигналы пиков мономерной и полимерной форм красителя. Были определены электрохимические характеристики покрытий политионина из среды ГЭР. Наклоны линейных участков зависимостей формальных потенциалов редокс-пиков от рН для мономерной и полимерной форм тионина из среды ГЭР были близки к нернстовскому наклону 59 мВ, что свидетельствует о равном числе протонов и электронов, участвующих в электрохимической реакции. Также был установлен сорбционный характер лимитирующей стадии электродной реакции для катодных пиков и смешанный диффузионно-сорбционный для анодных пиков.

ДНК из молок лосося включали в состав сенсора путем капельного нанесения. Полученный ДНК-сенсор использовали для оценки биоспецифического взаимодействия ДНК с цитостатическим препаратом эпирубицином методом спектроскопии электрохимического импеданса. Разработанный сенсор позволял определять эпирубицин в диапазоне от 1 мкМ до 100 мкМ с пределом обнаружения 500 нМ.

ЦИФРОВАЯ ПРОФОРИЕНТАЦИОННАЯ РАБОТА ПО КУРСУ КОЛЛОИДНОЙ ХИМИИ КАК НЕОБХОДИМАЯ РЕАЛЬНОСТЬ

К.А. Гордеева, В.А. Миннахметова

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

kristina.gordeeva.18@mail.ru

Профориентационная работа – одно из важных направлений в общеобразовательном учреждении (школа, лицей, гимназия). Как показывает практика, возрастает необходимость в проведении внеклассных мероприятий профориентационной направленности, не только по отдельному школьному предмету химии, но и также по возможным его разделам, в том числе коллоидной химии. Что, в свою очередь, способствует повышению мотивации к изучению предмета и ее отдельным разделам как физическая и коллоидная химия, а также повышает интерес учащихся к поступлению в высшие учебные технические учреждения. В данном исследовании применялся системно-деятельностный подход, который позволяет выделить основные результаты обучения и воспитания в контексте ключевых задач. В настоящем происходит частое обсуждение вопросов «профессиональное самоопределение», «профессиональная ориентация», «профориентационная работа» в школах. По мнению М.А. Болдиной и Е.В. Деевой, «профессиональная ориентация – это совокупность педагогических и психологических мер и комплекса информации разного рода, направленная на принятие решений по приобретению той или иной профессии, а также выбор оптимального для достижения этой цели пути дальнейшего профессионального образования» [1]. Однако обсуждается активно не только данное понятие, но и такое как «цифровой контент» и его роль в профориентационной работе, например, П. С. Ломаско, автор статьи из интернет-источника, говорит о том, что цифровой контент есть «информационное содержание любого цифрового ресурса в виде продукта: видеофрагмента, презентации, текстового документа» [2]. Для того чтобы разобраться в эффективности проведения профориентационных мероприятий с применением цифрового контента было решено провести опрос (входной и контрольный) по ходу проведения внеклассного мероприятия профориентационной направленности с учащимися 11-ого класса с применением цифрового контента. Результаты исследования свидетельствуют о повышении интереса к разделу химии «Коллоидная химия», появились умения и навыки постановки и выполнения лабораторных работ.

1. Болдина М.А., Деева Е.В. Понятие и сущность профориентационной работы в образовательном учреждении / М.А. Болдина, Е.В. Деева // [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/ponyatie-i-suschnost-proforientatsionnoy-raboty-v-obrazovatelnom-uchrezhdenii>
2. Ломаско, П.С. Роль интерактивного цифрового контента при реализации онлайн-обучения в современном университете / П.С. Ломаско // [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/rol-interaktivnogo-tsifrovogokontentaprirealizatsii-onlayn-obucheniya-v-sovremennom-universitete>

ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЕЙ НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОНО- И ДИКАРБОКСИЛИРОВАННОГО ФЕНОТИАЗИНА

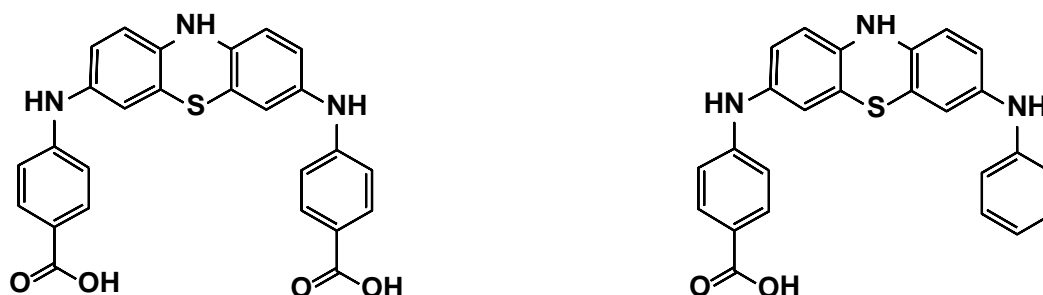
А. Гусейнова, С.В. Белякова, Г.А. Евтюгин, П.Л. Падня

Кафедра аналитической химии Химического института им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, Казань, Россия

guseinova.adelya@yandex.ru

Создание новых электрохимических сенсоров для анализа лекарственных препаратов, продуктов питания, объектов окружающей среды в основном базируется на применении химически модифицированных электродов. Расширение перечня модификаторов и внедрение новых медиаторов электронного переноса расширяет области потенциального применения сенсоров и улучшает их характеристики. Фенотиазины привлекают большое внимание как медиаторы электронного переноса за счет обратимого переноса электрона в широком интервале рН и способности к электрополимеризации с сохранением редокс-активности получаемых на электродах пленок.

Нами изучены моно- и дикарбоксилированные производные фенотиазина в присутствии полярных органических растворителей, смешивающихся с водой. Вариация функциональных групп фенотиазинового ядра позволяет менять заряд, гидрофобность и реакционную способность соединений в гетерогенных условиях переноса электрона. По результатам проделанной работы установлено влияние среды на обратимость стадий электронного переноса.



Во всех изученных водно-органических смесях (ацетон, ацетонитрил, изопропанол) моно- и дикарбоксилированные производные показали обратимое поведение на стеклоуглеродных электродах с образованием на вольтамперограмме одной пары симметричных пиков. Наличие небольших пар послепиков в анодной области, вероятно, связано с ассоциацией или адсорбцией молекул фенотиазинов.

Для монокарбоксилированного производного наиболее устойчивый и большой отклик был получен в кислой среде: пики имели более симметричный вид, чем в другой области рН. Для дикарбоксилированного производного влияние рН было менее выражено и не зависело от природы растворителя. В соответствии с зависимостью токов пика от скорости сканирования потенциала перенос электрона для обоих производных имел смешанный диффузионно-сорбционный контроль. Стехиометрия переноса электронов и ионов водорода (1:1) в кислой среде для монокарбоксилированного и в нейтральной для дикарбоксилированного фенотиазина совпадает.

Установленные электрохимические характеристики переноса электрона в дальнейшем планируется использовать в качестве медиатора электронного переноса в создании сенсоров на стеклоуглеродных электродах.

Исследования проводили при поддержке Российского фонда (грант 19-73-10134)

СОВМЕСТНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛОЧНОЙ И ПИРОВИНОГРАДНОЙ КИСЛОТ НА ПЛАНАРНОМ ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА И КОБАЛЬТА В УСЛОВИЯХ ПОРЦИОННО-ИНЖЕКЦИОННОГО АНАЛИЗА

Ю.П. Добрынина, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

juliad14.99@gmail.com

Молочная и пировиноградная кислоты являются важными химическими соединениями в организме человека. Оценка их содержания в биологических жидкостях необходима для диагностики различных заболеваний. Например, лактат – соль молочной кислоты (МК) - является маркером гипоксии, также его уровень в организме человека изменяется при наличии ряда заболеваний, таких как, кардиогенный или бактериально-токсический шок, дыхательная недостаточность, диабет. Пировиноградная кислота (ПК) занимает ключевую роль в процессе обмена веществ. Определение ПК в организме человека может помочь в раннем выявлении некоторых видов рака, в диагностике и лечении диабета II типа, дефицита витамина B1, сердечно-сосудистых заболеваний. Отношение концентрации лактата к пирувату используется в медицине для определения тяжести сердечного приступа, церебральной ишемии, гипоксии, а также для выявления типа лактатацидоза.

В данной работе рассмотрена возможность использования каталитического отклика электрода с бинарной системой Au-Co на МК и ПК в условиях порционно-инжекционного анализа (ПриА).

Измерения проводили в потенциостатическом режиме. При варьировании гидродинамических параметров были выбраны условия проведения ПриА для каждого из соединений: объем инжектируемой пробы равен 500 мкл, скорости инъекции 30 мл/мин, величина налагаемого потенциала 0.85 В для МК, 1.05 В для ПК. Линейная зависимость тока пика от концентрации аналита наблюдается в интервале от 5×10^{-5} до 5×10^{-2} М для МК и от 5×10^{-5} до 5×10^{-2} М для ПК. Определена возможность определения МК и ПК при совместном присутствии на электроде с бинарной системой Au-Co в условиях ПриА. Разность потенциалов пиков составляет 200 мВ.

Таким образом, ХМЭ на основе бинарной системы Au-Co можно рекомендовать для совместного амперометрического определения МК и ПК. Разработанный порционно-инжекционный амперометрический способ определения отличается простотой и высокой чувствительностью, воспроизводимостью, а также производительностью и экспрессностью метода анализа.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

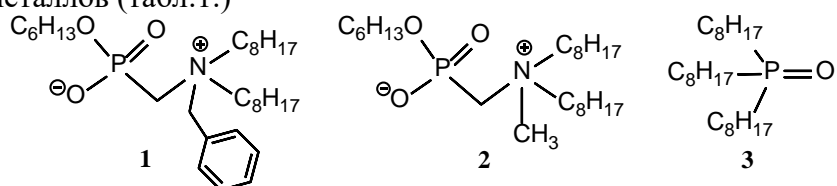
МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ ИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ ЛИПОФИЛЬНЫМИ ФОСФОРИЛИРОВАННЫМИ БЕТАИНАМИ И ИК-СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ С ИХ УЧАСТИЕМ

Д.Р. Долгова, Н.В. Давлетшина, Р.А. Черкасов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

galeevadilyaraa@gmail.com

Ранее нами было показано, что α -аминофосфорильные соединения проявляют селективность к редкоземельным металлам в процессах мембранной экстракции [1, 2]. В настоящей работе мы приводим результаты исследований мембранно-транспортных и экстракционных свойств липофильных фосфорилированных бетаинов **1** и **2** в сравнении с промышленным переносчиком – триоктилфосфиноксидом **3** по отношению к ионам редкоземельных металлов (табл. 1.)



Переносчики **1** и **2** представляют собой бидентатные лиганды с основными центрами координации у атомов кислорода фосфорильной группы, в то время как промышленный экстрагент **3** – монодентатный лиганд.

Таблица 1.

№	Величины потоков J_i 10^5 моль/(мин·м ²) (растворитель-1,2-дихлорбензол)					
	La	Nd	Sm	Eu	Gd	Ho
1	52.3 ± 0.8	11.2 ± 0.3	13.2 ± 0.9	82.1 ± 0.3	14.3 ± 0.5	26.0 ± 0.9
2	63.4 ± 1.2	73.6 ± 2.6	24.7 ± 0.3	98.6 ± 1.4	17.2 ± 1.8	34.0 ± 2.6
3	58.7 ± 0.6	7.8 ± 0.9	6.2 ± 1.0	34.3 ± 9.1	6.1 ± 0.9	19.9 ± 0.11

Согласно представленным данным переносчик **1** проявляет ярко выраженную селективность к ионам лантана, неодима и европия, в то время как переносчик **2** только к ионам лантана и европия. Оба фосфорилированных бетаина более эффективны в транспорте ионов трехзарядных металлов, по сравнению с промышленным переносчиком **3**. По ИК-спектрам органической фазы после проведения жидкость-жидкостной экстракции в системе 1,2-дихлорбензол/вода установлены основные центры координации переносчиков.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00335, <https://rscf.ru/project/22-23-00335/>

- Н.В. Давлетшина, И.Р. Насыров, А.Р. Хабибуллина, Р.Р. Давлетшин, А.З. Гайнуллин, Р.А. Черкасов. ЖОХ, 2019, **89**, 12, 1915-1524.
- А.Р. Гарифзянов, Н.В. Давлетшина, А.М. Гайнеев, А.З. Гайнуллин, Р.А. Черкасов. ЖОХ, 2018, **88**, 9, 1506-1509.

ПОЛУЧЕНИЕ ТЕРБИЙ-СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ТРИГЛИЦИДИЛФОСФАТА

Т.Н. Елисеева, Р.Р. Амиров

*Казанский федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

wicpot@mail.ru

Введение ионов редкоземельных элементов в полимеры на сегодняшний день является перспективным способом получения материалов с люминесцентными свойствами для таких областей применения как оптика и квантовая электроника, биомедицина и производство солнечных элементов. РЗЭ-содержащие композиции находят применение как катализаторы органических реакций, в приложениях для защиты от подделок, в качестве люминесцентных гидрогелей. Одним из эффективных способов введения лантанидных ионов в полимерную матрицу является использование их комплексов. Однако данный способ несвободен от недостатков, поскольку требует предварительного синтеза лигандов, а также последующего синтеза комплексов лантанидов с этими соединениями. Ранее нами было показано, что некоторые простые соли РЗЭ могут хорошо растворяться в жидких фосфорсодержащих глицидиловых эфирах.

Цель работы состоит в изучении особенностей получения и свойств полимеров на основе триглицидилфосфата (ТГФТ) и пентагидрата нитрата тербия, $Tb(NO_3)_3 \cdot 5H_2O$. Химическая структура и чистота ТГФТ были подтверждены методами ИК- и ЯМР-спектроскопии. Процесс полимеризации изучали методами дифференциальной сканирующей калориметрии и реометрии в режиме осцилляции. На основании полученных результатов предположено, что раскрытие эпоксидных циклов ТГФТ в присутствии ионов тербия происходит по механизму катионной полимеризации с одновременным испарением воды. Были оптимизированы температурно-временные режимы полимеризации и получены полимеры с различным содержанием тербия (до 25 мас.%). Теплофизические и термомеханические свойства полимеров были изучены на динамическом механическом анализаторе и дилатометре, показано, что тербий-содержащие полимеры обладают достаточно высокими жесткостью, прочностью и теплостойкостью. Люминесценцию соли, жидкого и отвержденного полимеров исследовали на спектрофлуориметре. Полученные полимеры обладают высокой люминесцирующей способностью, концентрационного тушения в изученном интервале содержаний тербия не наблюдали.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II)/ЦИНКА(II) С АРОМАТИЧЕСКИМИ ДИИМИНАМИ И АМИНОКИСЛОТАМИ

А.В. Ермолаев, Э.М. Гилязетдинов, Н.Ю. Серов, М.С. Бухаров, Л.Ф. Гаинтдинова,
А.А. Гимадиева, В.Г. Штырлин

*Химический институт им. А.М. Бутлерова
Казанского федерального университета, Казань, Россия*

Anton-Hitchhiker@yandex.ru

Основной проблемой в разработке медицинских препаратов на сегодняшний день является отсутствие исчерпывающих знаний о природе химико-биологических процессов. Доскональное изучение связей между строением, физико-химическими и биологическими свойствами веществ позволило бы начать целенаправленный синтез лекарственных средств. Особенно перспективны в этом отношении комплексы биометаллов, обладающие относительно низкой токсичностью и участвующие в нормальном обмене веществ в организме. Среди них значительную роль в различных химико-биологических системах играют комплексы меди(II) и цинка(II), регулирующие многие процессы окисления-восстановления и регенерации.

В настоящей работе методом рН-метрии изучены равновесия в растворах гомо- и гетеролигандных комплексов цинка(II) с биолигандами (аминокислоты, ароматические диимины) на фоне 0.15 М хлорида натрия при 37.0 °С. Результаты титрований обработаны по программе STALABS [1]. По итогам моделирования сделаны выводы о причинах зависимости устойчивости комплексов цинка(II) от природы лигандов. Термодинамические параметры образования комплексов цинка(II) сравнены с соответствующими параметрами аналогичных комплексов меди(II), полученными в предыдущих исследованиях [2].

1. Krutikov A.A., Shtyrlin V.G., Spiridonov A.O., Serov N.Yu., Il'yin A.N., Gilyazetdinov E.M., Bukharov M.S. *J. Phys. Conf. Ser.* 2012. V. 394. 012031, P. 1-6.
2. Ермолаев А.В., Гилязетдинов Э.М., Серов Н.Ю., Бухаров М.С., Штырлин В.Г. *Сб. материалов XV Всероссийской молодежной научно-инновационной школы «Математика и математическое моделирование»* (Саров, 13-15 апреля 2021 г.). Саров, 2021. С. 6-7.

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ С N-ДОНОРНЫМИ ЛИГАНДАМИ

М.А. Жернаков, И.И. Мирзаянов, Н.Ю. Серов, Э.М. Гилязетдинов, М.С. Бухаров, В.Г. Штырлин

*Химический институт им. А.М. Бутлерова
Казанского федерального университета, Казань, Россия*

mrlambo52@gmail.com

Координационные соединения лантанидов стали интенсивно изучаться после получения первых сведений о комплексах с O-донорными лигандами (β -дикетонаты), а затем и с N-донорными лигандами, основанных на фенилтерпиридине (Ptpy) или 1,10-фенантролине (Phen). Известно, что собственная эмиссия ионов лантанидов (Ln^{3+}) довольно слаба из-за запрещенного характера $f \rightarrow f$ переходов, поэтому для повышения эффективности эмиссии используются различные органические лиганды с сопряженной ароматической системой ("антенны"). В качестве нейтральных сенситайзеров эмиссии Ln^{3+} используются приведенные выше ароматические N-доноры и различные их производные. Так, комплексы с Ptpy обнаруживают более высокий квантовый выход люминесценции и более длительное время затухания эмиссии, а комплексы с лигандами ряда Phen обнаруживают лучшую термическую стабильность и устойчивость к влаге воздуха [1].

В рамках данной работы с целью поиска более совершенных систем с хорошими фотофизическими и термическими параметрами и комбинации уникальных свойств лиганда и иона металла были синтезированы и охарактеризованы комплексы общего состава $[\text{Ln}(\text{L})_2\text{Cl}_3]$, где $\text{Ln}^{\text{III}} = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Y}, \text{Yb}$; $\text{L} = \text{DPQ}$ – дипиридо[3,2-f:2',3'-h]хиноксалин, MeDPQ – 2-метилдипиридо[3,2-f:2',3'-h]хиноксалин, демонстрирующие $f \rightarrow f$ эмиссию соответствующего Ln^{3+} в видимой (Sm, Eu, Tb, Dy) и/или ближней ИК области спектра (Sm, Dy, Yb), и $\pi \rightarrow \pi^*$ эмиссию лиганда в комплексах с Gd, Y. Комплексы с Sm^{3+} , Eu^{3+} , Gd^{3+} , Tb^{3+} и Yb^{3+} удалось выделить в фазово-чистом состоянии и детально изучить их свойства.

1. M.A. Zhernakov, A.E. Sedykh, J. Becker, M. Maxeiner, K. Müller-Buschbaum, V.G. Shtyrilin, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2022**, 648, e202200230.

ЭЛЕКТРОДЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(БРОМКРЕЗОЛОВОГО ПУРПУРНОГО) И ПОЛИ(ФЕНОЛОВОГО КРАСНОГО) И ИХ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ

А.С. Жупанова, Г.К. Зиятдинова

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

Zhupanova.Nastya@mail.ru

Полимер-модифицированные электроды активно применяются в органическом электроанализе. Один из типов мономеров, представляющих интерес, являются трифенилметановые красители, полимеризация которых приводит к формированию непроводящих покрытий. Поэтому для обеспечения достаточной проводимости электрода, а также большей площади поверхности используют углеродные наноматериалы. Среди решаемых с помощью таких электродов задач можно выделить одновременное определение природных фенольных антиоксидантов.

Разработаны электроды, модифицированные послойно функционализированными полиаминобензолсульфоновой кислотой одностенными углеродными нанотрубками и поли(бромкрезоловым пурпурным) или поли(феноловым красным). Оптимизацию условий электрополимеризации красителей проводили по отклику смесей феруловой кислоты и ванилина (для бромкрезолового пурпурного) и кофейной, феруловой и *n*-кумаровой кислот (для фенолового красного). Предложенные электроды обеспечивают возможность одновременного детектирования вышеуказанных аналитов. Электроды охарактеризованы методами сканирующей электронной микроскопии и комплексом электрохимических методов. Показано статистически достоверное увеличение эффективной площади поверхности и скорости переноса электрона по сравнению с не модифицированным электродом.

В условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии в среде буферного раствора Бриттона-Робинсона рН 2.0 электроды дают линейные отклики на целевые аналиты при совместном присутствии. Полученные характеристики превосходят описанные ранее для индивидуального определения аналитов. Одновременное вольтамперометрическое определение проведено впервые.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ РАЗЛОЖЕНИЯ ОЛЕАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА(III) НА РАЗМЕР ПОЛУЧЕННЫХ НАНОЧАСТИЦ

Ю.И. Журавлева, А.А. Быкова, А.Р. Медведева

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

yulialab6@mail.ru

Наночастицы оксидов железа (НЧОЖ) до сих пор являются наиболее широко изучаемыми и используемыми наноматериалами. Это связано с тем, что они обладают уникальными физико-химическими и магнитными свойствами, такими как суперпарамагнетизм, высокая коэрцитивность, низкая температура Кюри и высокая магнитная восприимчивость. Сочетание таких свойств открывает широкие возможности использования НЧОЖ в различных областях, таких как многотерабитное хранение данных, катализ, адресная доставка лекарств, магнитная гипертермия, контрастные агенты для магнитно-резонансной томографии (МРТ), биосенсоры, биосепарация, термоабляция и разработка «умных» материалов. Свойства НЧОЖ в значительной степени зависят от их размера и формы. Таким образом, совершенствование методов получения НЧОЖ разного размера, формы, состава, кристаллической структуры и поверхности вызывает большой исследовательский интерес.

На сегодняшний день метод термического разложения соединений-прекурсоров в растворе (heating-up) со строгим контролем температуры представляется наиболее подходящим, поскольку позволяет в максимальной степени контролировать размер и распределение НЧОЖ по размерам. При проведении процесса термического разложения при температурах 320, 350 и 370°C был показан рост размеров НЧОЖ с увеличением температуры разложения, что однако приводит к ухудшению монодисперсности НЧОЖ. Образец НЧОЖ, полученный при температуре 370°C, в отличие от всех других полученных образцов, не образовывал устойчивых растворов в н-гексане. Плохая коллоидная стабильность растворов НЧОЖ, возможно, связана с частичным разрушением олеатной оболочки при высоких температурах. В связи с этим, температура 370°C является предельной для разложения олеатных комплексов железа(III).

РОДАНИДНЫЕ КОМПЛЕКСЫ КОБАЛЬТА(II) В УЛЬТРАМИКРОГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ

Ю.И. Журавлева, А.Ф. Рецеева, К.Ф. Рахматуллина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

yulialab6@mail.ru

Известно, что ионы кобальта (II), выполняют в живых организмов очень важную физиологическую роль, находясь во многих биологических важных макромолекул, которые функционируют в составе высокоорганизованных ультрамикроретерогенных средах.

На основании данных спектрофотометрии в модельных ультрамикроретерогенных средах на основе неионных ПАВ подтверждено образование комплексных соединений кобальта(II) с роданид-ионами разного состава: с октаэдрической геометрией $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_5\text{NCS}]^+$, $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{NCS})_2]$ и тетраэдрической геометрией $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})(\text{NCS})_3]^-$ и $[\text{Co}(\text{NCS})_4]^{2-}$. По наличию в спектрах поглощения максимума при длине волны 530 нм подтверждено, что в водных растворах даже при избытке лиганда присутствуют комплексы с октаэдрической координацией.

Установлено, что образование комплекса $[\text{Co}(\text{NCS})_4]^{2-}$ (длина волны максимума поглощения 620 нм) стимулируется в растворах нПАВ, что объясняется ассоциацией его с катионами при переносе из воды в состав неионных мицелл. Нахождение противоионов (ионов калия, аммония и др.) в полярной области мицелл обеспечивается их краун-эфироподобной координацией с оксиэтильными цепями нПАВ.

Эффективность нПАВ в образовании тетраэдрического тиоцианатного комплекса кобальта возрастает с удлинением оксиэтильной цепи: протяженность оксиэтильной цепи для ряда оксиэтилированных изооктифенолов является фактором стабилизации комплекса $[\text{Co}(\text{NCS})_4]^{2-}$ в составе неионных мицелл.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И СТЕКЛОВАНИЯ БЕНЗОКСАЗИНОВЫХ МОНОМЕРОВ

Р.Р. Зайнулин, К.А. Андрианова, Л.М. Амирова

*Казанский федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

Rifat55539@mail.ru

Полибензоксазины представляет собой семейство термореактивных фенольных смол, которое в последние десятилетия привлекло значительный интерес из-за высокой термостабильности, отличной химической стойкости, низкой диэлектрической проницаемости, привлекательной огнестойкости, отсутствия побочных продуктов отверждения и широкой гибкости молекулярного дизайна. Стоит отметить, что свойства полибензоксазина легко можно изменять, создавая мономеры с различной молекулярной структурой. В настоящее время синтезировано большое количество бензоксазинов различного химического строения, однако исследователями мало внимания уделяется процессам стеклования и кристаллизации мономеров и их реологическим свойствам. В то же время эти характеристики являются важными при переработке и хранении бензоксазиновых мономеров в различных технологических процессах: при получении препрегов, пленочных связующих и покрытий.

Цель этой работы состоит в изучении поведения ряда бензоксазинов с различной химической структурой, в том числе на основе ароматических диаминов, в широком диапазоне температур и условий нагрева для выявления особенностей их стеклования и кристаллизации. Химические структуры и чистота мономеров бензоксазина была подтверждена методами ИК и ЯМР спектроскопии. Кристаллизация и стеклование мономеров бензоксазинов изучали с помощью динамической ДСК и реометрии в режиме осцилляции при различных скоростях нагрева. Был проведен анализ влияния химического строения бензоксазинов на процессы стеклования и кристаллизации, а также на реологические свойства расплавов мономеров. Показано, что бензоксазиновые мономеры на основе ароматических диаминов обладают склонностью к стеклованию при высоких температурах, что обуславливает резкое повышение вязкости расплава и снижает способность к кристаллизации. Бензоксазины на основе бисфенола А стеклуются при значительно низких температурах и процесс кристаллизации менее затруднен. Полученные данные были использованы для выбора бензоксазиновых мономеров для различных технологий: для получения препреговых и пленочных связующих, водоэмульсионных составов и покрытий.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ КРИСТАЛЛЫ НА ОСНОВЕ ХЛОРИДА/БРОМИДА ТЕТРАМЕТИЛАММОНИЯ МАРГАНЦА

К.С. Зимин^{a,b}, А.М. Гайфутдинов^{a,b}, Л.М. Амирова^a, А.Н. Солодов^b

^a *Институт авиации, наземного транспорта и энергетики КНИТУ-КАИ, Казань, Россия*

^b *Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*

kostzim@list.ru

Свинцово-галогенидные (перовскитные) квантовые точки имеют отличные фотоэлектрические характеристики по сравнению с широко используемыми в промышленности квантовыми точками на основе неорганических полупроводников, это длительный срок службы, превосходные люминесцентные свойства с высоким квантовым выходом люминесценции и простая техника переработки [1]. Однако перовскитные квантовые точки, содержащие тяжелые металлы, например, Pb и Cd, очень токсичны для окружающей среды и человека [2]. Поэтому существует необходимость использования экологически безопасных галогенидов металлов в качестве люминесцентных материалов. Предлагается использование люминесцентных монокристаллов хлорида/бромидов тетраметиламмония марганца, которые могут обладать высокими люминесцентными свойствами и стабильностью. Также изучается возможность их введения в полимерную матрицу на основе полипропилена для повышения стабильности и расширения возможностей их переработки. Такая композиция люминесцентных кристаллов и полипропилена имеет широкие возможности к переработке, например, литья под давлением или методами послойного наплавления (FDM) 3Д печати. Люминесцентные кристаллы могут использоваться в производстве дисплеев, сцинтилляционных экранов, LED светодиодов.

1. Jellicoe T. C. Synthesis and optical properties of lead-free cesium tin halide perovskite nanocrystals / T. C. Jellicoe, J. M. Richter, H. F. Glass, M. Tabachnyk, R. Brady, S. E. Dutton, A. Rao, R. H. Friend, D. Credgington, N. C. Greenham // *Journal of the American Chemical Society*. – 2016. – Т. 138, № 9. – С. 2941-2944.
2. Babayigit A. Toxicity of organometal halide perovskite solar cells / A. Babayigit, A. Ethirajan, M. Muller, B. Conings // *Nature materials*. – 2016. – Т. 15, № 3. – С. 247-251.

МНОГОУРОВНЕВЫЕ МИКРОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ БИОСОВМЕСТИМЫХ ПОЛИМЕРОВ

Л.С. Зубайдуллина, В.Ю. Черных, А.В. Герасимов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

lian-usman@mail.ru, vitalik1271@yandex.ru, Alexander.Gerasimov@kpfu.ru

Разработка эффективных неинвазивных систем доставки лекарственных препаратов пролонгированного действия для лечения глазных заболеваний в настоящее время является предметом активного изучения. Широко используемые классические офтальмологические препараты, приготовленные в виде раствора и суспензии, обладают низкой эффективностью действия, поскольку очень быстро удаляются с поверхности глаза (менее 3 мин), что в конечном итоге ограничивает их биодоступность. При использовании таких препаратов лишь 5% фармацевтически активного ингредиента способно достичь внутренних тканей глазного яблока. Альтернативой классическим офтальмологическим препаратам являются композиции, содержащие в своем составе наночастицы в качестве носителей активного компонента. Применение таких систем обеспечивает необходимую для эффективного лечения длительность пребывания источника фармацевтически активного ингредиента в глазном яблоке, с одной стороны, и пролонгированность высвобождения лекарственного средства, с другой. Вместе с тем, остается нерешенной проблема доставки самих наночастиц внутрь глазного яблока.

Перспективной стратегией решения этой задачи считается использование полимерной капсулы, содержащей наночастицы. При контакте со слезной жидкостью полимерная оболочка капсулы должна быстро растворяться, высвобождая наночастицы на поверхности глазного яблока. Таким образом, можно сформулировать требования к материалу оболочки капсулы: биосовместимость, быстрая растворимость, биоразлагаемость и низкая системная токсичность. Таким требованиям удовлетворяют синтетический полимер – поливинилпирролидон хорошо зарекомендовавший себя в качестве материала для систем доставки лекарственных препаратов, природные циклические олигосахариды – циклодекстрины, способные образовывать водорастворимые комплексы со многими липофильными лекарственными компонентами и облегчающие проникновение активных ингредиентов через слезную пленку на поверхности глаза, а также биомолекулы – олигопептиды, образующие гели, способные эффективно инкапсулировать различные соединения, в том числе фармацевтически активные молекулы. Перечисленные типы соединений обладают еще одним неоспоримым достоинством, обеспечивающим их перспективность для применения в офтальмологических препаратах: они повышают вязкость слезной жидкости, тем самым увеличивая время нахождения на поверхности глазного яблока наночастиц, содержащих активные фармацевтические ингредиенты, а, следовательно, способствуют проникновению этих частиц.

В рамках настоящей работы впервые были получены микрокапсулы «матрешки» на основе поливинилпирролидона, содержащие в своем составе полимерные наночастицы на основе поликапролактона с включенным в их состав активным фармацевтическим ингредиентом из класса противовоспалительных средств (ибупрофен). Для полученных систем было оценено фазовое состояние и степень загрузки активных ингредиентов, изучена кинетика их высвобождения в раствор из микрочастиц. Полученные в ходе выполнения проекта результаты могут быть использованы при оптимизации процесса получения многоуровневых микрочастиц на основе биосовместимых полимеров для интравитреальной доставки активных фармацевтических ингредиентов.

КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССА ОТВЕРЖДЕНИЯ СВЯЗУЮЩЕГО ВСЭ-62 ПО ДАННЫМ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

М.Р. Ибрагимов, А.М. Гайфутдинов, О.Л. Хамидуллин

*Казанский Национальный Исследовательский Технический Университет
им. А.Н. Туполева-КАИ, Казань, Россия*

sw1ft1704200@mail.ru, amir_gaifutdinov@mail.ru, khamidullinoskarl@mail.ru

Ключевые слова: контроль отверждения, диэлектрические свойства, степень конверсии, диэлектрические измерения.

Контроль процесса отверждения полимерной матрицы в реальном времени является одним из перспективных направлений для изготовления высококачественных конструкций в области авиастроения. Оптимизация режимов отверждения в производстве позволяет получать максимально высокое качество изделий при минимальных затратах, так как свойства получаемых полимерных композитов напрямую зависят от данного производственного этапа [1-2]. На сегодняшний день процесс отверждения исследуется в основном по данным дифференциальной сканирующей калориметрии и вискозиметрии, после чего разрабатывается режим формования. Однако результат испытаний на микропробах может отличаться от результата при производстве реальных изделий. Диэлектрический анализ позволяет контролировать весь цикл отверждения и может быть использован в условиях реального производства.

В работе проводится анализ процесса отверждения связующего ВСЭ-62 (ВИАМ, Россия) по данным диэлектрического анализа. Мониторинг процесса отверждения осуществлялся на диэлектрическом анализаторе DiAMon Plus INASCO в диапазоне частот от 0,5 Гц до 20 кГц. Степень конверсии в различные моменты процесса оценивалась через импеданс (полное сопротивление связующего) в точке экстремума на частотной зависимости [3]. Процесс отверждения оценивался на основе данных при динамическом нагреве при скоростях от 0,25 до 2К/мин. Данные аппроксимировались в рамках кинетического уравнения Камал-Соурера.

1. Л. Мошинский. *Эпоксидные смолы и отвердители*, 1995 - 370 с.
2. В.И. Халиулин, В.В. Батраков. *Технология производства изделий из композитов: технология интегральных конструкций*, 2018 – 192 с.
3. А. Vassilikou-Dova, I.M. Kalogeras. *DEA of polymers: fundamentals and applications*, 2009 – 117 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СИГМА-КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ (II) С ЛИГАНДАМИ НА ОСНОВЕ 1,10-ФЕНАНТРОЛИНА В ГОМОГЕННОЙ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ ЭТИЛЕНА

А.С. Иванов, А.В. Сухов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

minandreybit@mail.ru

Производные 1,10-фенантролина благодаря своей высокой координационной способности образуют прочные комплексные соединения с широким спектром переходных металлов, находящие свое применение в различных областях, например в катализе – это реакции окисления, восстановления, кросс-сочетания, циклоприсоединения и т.д. Среди комплексов переходных d-металлов, значительное внимание было уделено комплексам на основе никеля (II) несущих би-, три- и полиидентантные лиганды на основе иминов, пиридина, имидазола, пиррола, пиразола и 1,10-фенантролина (phen) как катализаторов олигомеризации этилена, показывающих, по сравнению с более ранними типами комплексов, существенно более высокую селективность по целевому продукту и по положению двойной связи.

Актуальность исследования в области селективных катализаторов олигомеризации этилена обуславливается повышенной тенденцией к увеличению ежегодного промышленного потребления короткоцепочных линейных альфа-олефинов, основным методом получения которых является гомогенная олигомеризация этилена на металлокомплексах. В связи с этим установление зависимости изменения каталитических характеристик системы в результате варьирования состава металлокомплекса является важной научной-промышленной задачей.

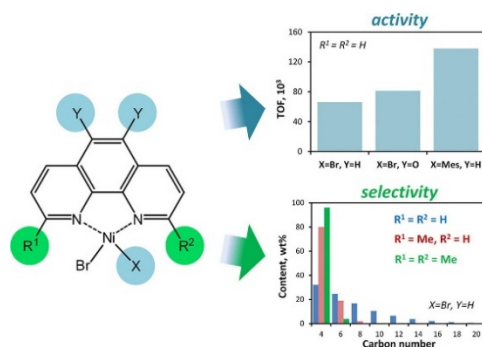


Рисунок 1 – Отображение результатов влияния.

В нашей работе было выполнено сравнительное исследование влияния модификации 1,10-фенантролинового комплекса никеля (II) на его каталитические свойства в олигомеризации этилена (рис.1). Установлено, что стерические препятствия вблизи металлического центра, вызванные метильными группами в 2- и 9-положениях 1,10-фенантролина, приводят к снижению активности до $(26,8-52,2) \cdot 10^3$ моль_{C₂H₄}·моль_{Ni}⁻¹·ч⁻¹ и повышению селективности по отношению к бутенам до 80-96%. Образование связи Ni-C увеличивает олигомеризационную активность комплексов Ni(II) с лигандами phen и dmphen (2,9-диметил-1,10-фенантролин) до $(83,5-138,0) \cdot 10^3$ моль_{C₂H₄}·моль_{Ni}⁻¹·ч⁻¹, где в свою очередь σ-комплекс с лигандом dmphen способствует преимущественной димеризации этилена с выходом бутенов до 96%.

1. Bekmukhamedov G. E. et al. Catalytic performance of nickel (II) complexes bearing 1, 10-phenanthroline based ligands in homogeneous ethylene oligomerization // Polyhedron. – 2022. – Т. 223. – С. 115978.

ПОЛУЧЕНИЕ ГИБРИДНЫХ МИЦЕЛЛ НА ОСНОВЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЁННЫХ ПОЛИЭФИРПОЛИОЛОВ И НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ ДЛЯ ИНКАПСУЛЯЦИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ.

А.Ф. Кадиров, В.М. Басова, А.А. Ханнанов, М.П. Кутырева

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

aigzkadirov@gmail.com

Эффективные лекарственные препараты помимо воздействия на очаг заболевания могут оказывать токсическое воздействие на весь организм. Инкапсуляция субстратов за счёт ковалентного связывания, гидрофобных или ионных взаимодействий позволяет увеличить их эффективность, понизив токсичность [1], и улучшить качество лечения социально значимых заболеваний. Системы адресной доставки на основе мономолекулярных мицелл сверхразветвлённых полимеров (СРП) или дендримеров, являются переходным этапом между системами доставки с динамическим и постоянным составом [2]. Однако растворимость, коллоидная устойчивость и дисперсность индивидуальных СРП, нагруженных субстратом, недостаточна для их активного применения. Выходом из данной ситуации является создание гибридных мицелл, которые могут сочетать преимущества индивидуальных молекул и неизученные ранее биоактивные свойства. В процессе работы были исследованы свойства СРП различных генераций (Boltorn H20, H30, H40) и неионогенного ПАВ (Triton X-100) для дальнейшего сравнения с поведением гибридных мицелл на их основе. Как указано выше, ключевой характеристикой системы, загруженной субстратом, является её монодисперсность. Для её оценки и выявления оптимальных соотношений СРП/ПАВ системы СРП и СРП/ПАВ исследованы методом NTA (Nanoparticles tracks analysis). Были графическим методом определены основные физико-химические характеристики (рис.1а,б). В качестве зонда для оценки способности изучаемых систем к солюбилизации был использован азокраситель Sudan II (рис.2а,б).

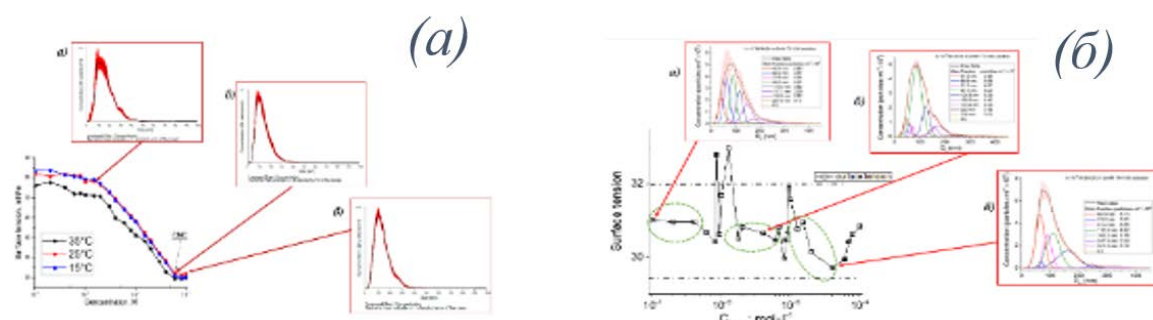


Рисунок 1 – (а,б). Изотермы поверхностного натяжения и распределение размеров наночастиц в ключевых для самосборки точках для систем с различными соотношениями ПАВ/полимер.

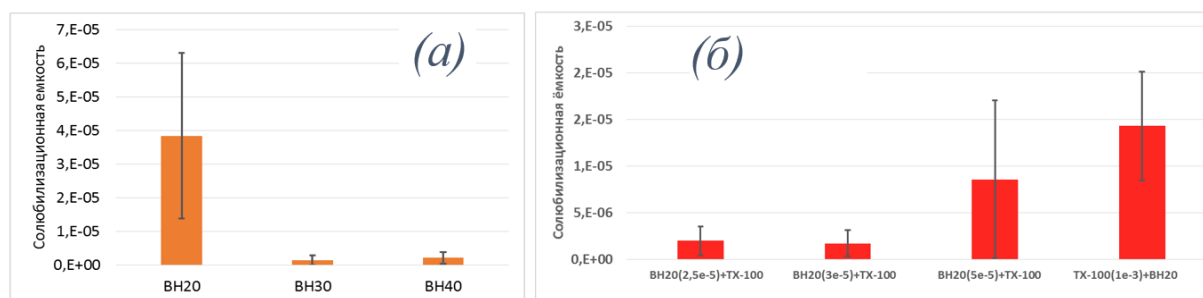


Рисунок 2 – Солюбилизационная ёмкость систем по отношению к Sudan II (а-СРП, б-СРП/ПАВ).

Параметры самоассоциации, получаемые нами в ходе экспериментов, в дальнейшем позволят нам найти оптимальные точки для загрузки/выгрузки субстратов (лекарственных

препаратов, ферментов [3]) и оценить их влияние на процессы самоорганизации в системе. Следующим шагом станет выяснение влияния разработанных систем доставки на ферментативную или биологическую активность целевых субстратов и поиск условий для их загрузки и выгрузки.

1. Hermanson, G.T. Liposome Conjugates and Derivatives / G.T. Hermanson // *Bioconjugate Tech.* – 2013. – P. 921-949.
2. Prabu, S. Morphology, optical, thermal and antimicrobial studies of ibuprofen-based hyperbranched polyester / S. Prabu, A.S. Nasar, C. Sivakumar // *Bull. Mater. Sci.* – 2020. – V. 43. – № 1. – P. PAGE. doi:10.1007/s12034-020-02194-4/
3. Arezoo Saadati. Biomedical application of hyperbranched polymers: Recent Advances and challenges./ Arezoo Saadati, Mohammad Hasanzadeh, Farzad Seidi. // *TrAC Trends in Analytical Chemistry.* – 2021.

ХРОНОАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ АНТИОКСИДАНТНОЙ ЕМКОСТИ ЭФИРНЫХ МАСЕЛ

А.Д. Калмыкова, Г.К. Зиятдинова

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

alena.kalmykova.pnb.2000@mail.ru

Эфирные масла представляют интерес как объекты анализа в современной химии, биотехнологии, что обусловлено их биологически активными свойствами, в том числе антиоксидантными. Традиционным методом анализа эфирных масел является газовая хроматография с масс-спектрометрическим детектированием, позволяющая как идентифицировать состав эфирных масел, так и провести количественное определение компонентов. Присутствие фенольных антиоксидантов и широкого круга терпенов позволяет использовать для характеристики антиоксидантных свойств эфирных масел электрохимические методы. Тем не менее это направление исследований практически не рассматривается.

Рассмотрено вольтамперометрическое поведение эфирных масел из 15 видов растительного сырья на электроде, модифицированном карбоксилированными многостенными углеродными нанотрубками, в среде фосфатного буферного раствора рН 7.0. В условиях дифференциальной импульсной вольтамперометрии эфирные масла дают выраженные ступени окисления в диапазонах 0.0-0.75 и 0.75-1.5 В, обусловленные электроокислением фенольных компонентов и терпеноидов соответственно, что подтверждается потенциалами окисления индивидуальных соединений. Для девяти эфирных масел регистрируются четкие пики окисления только в диапазоне 0.75-1.5 В, что согласуется с данными газовой хроматографии по их основным компонентам.

На основе полученных данных разработан двухступенчатый хроноамперометрический подход к оценке антиоксидантной емкости эфирных масел. Электролиз проводили при потенциалах 0.80 и 1.4 В. Стационарное состояние устанавливается за 75 с. Антиоксидантную способность выражали как ток окисления образца при каждом из потенциалов в пересчете на 1 мл эфирного масла. Проведен скрининг 37 образцов эфирных масел по их антиоксидантной емкости. Полученные данные сопоставлены со стандартными антиоксидантными параметрами и получены положительные корреляции, подтверждающие правильность хроноамперометрического подхода.

СОЗДАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ И СОРБЦИОННО-АКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ

А.С. Карсункина, И.А. Платонов, Е.А. Новикова

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева,
Самара, Россия*

karsunkina.alesya@mail.ru

На сегодняшний день эколого-аналитический контроль воздушных сред, а также создание методик определения загрязнителей различного рода являются актуальными направлениями исследований. Снижение загрязнений атмосферы от промышленных выбросов возможно путем разработки и внедрения систем очистки газов [1]. На сегодняшний день существует потребность в создании поверхностно-слоистых сорбентов, у которых сорбционно-активный материал нанесен на поверхность носителя различной пористости.

Целью представленной работы является изучение возможности создания сорбционных систем на основе блочно-порозного материала и активированного угля.

Блочно-порозная система, известная также как «металлорезина», разработана учеными Самарского университета и получила свое название, сочетая свойства двух материалов. В ходе работы были получены экспериментальные образцы блочного типа на основе стали и алюминия различной порозности, на поверхность которых наносился активированный уголь, а также полиметилсилоксан (ПМС) в качестве связующего компонента.

Оценены сорбционные свойства полученных образцов на примере концентрирования микропримесей гексана. Влияние материала основы, а также применения ПМС в качестве связующего на сорбционные характеристики не выявлено. Наилучшие результаты по сорбции и десорбции гексана были получены при использовании сорбционных систем с порозностью 0,75. При этом степень извлечения гексана в 14 раз больше, чем при использовании порошкообразного активированного угля. Установлена возможность неоднократного использования сорбционных систем для концентрирования микропримесей гексана.

1. Савин, А.В. Органомодифицированные сорбенты для удаления легких нефтяных углеводородов из водной и воздушной сред: дис.... канд. техн. наук / Савин Андрей Владимирович. – Казань, 2014. – 178 с.

ОРГАНИЗАЦИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ХИМИИ ПРИРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

А.Р. Касимова

КФУ, Химический институт им.А.М.Бутлерова, Казань, Россия

adelyakas1108@mail.ru

Важное направление в усовершенствовании образования является следование подходам ФГОС, один из которых акцентирует необходимость в качественном усвоении всей школьной программы, в частности, химии, и дальнейшей успешном сдачи единого государственного экзамена. С 2020 года в ЕГЭ появились задания, которые касаются природных соединений. Данное исследование актуально для преподавателей, целью которых является получение знаний о химии природных соединений их подопечными для активного использования их при решении заданий ЕГЭ по химии.

С целью изучения эффективности преподавания данных тем я разобрала особенности преподавания химии природных соединений в классах с разным профилем обучения. В случае с гуманитарным профилем учебный материал следует связать с материалом гуманитарных предметов, естественно-научный профиль популярен среди будущих медиков, поэтому, следует делать упор на биологию, физико-математическому профилю важно показать физические приборы, таких как рН метр, спектрофотометр. Социально-экономический профиль предусматривает рассмотрение социальных проблем химии современного мира. Разумеется, каждый случай индивидуален, разные методы, средства обучения необходимо применять в каждом конкретном случае.

В современных реалиях, учитель, который идет в ногу со временем, должен учитывать профилизацию, уровни, на которых реализуется учебная программа, возможность отработки материала на внеурочной деятельности. Только в этом случае у обучающихся есть возможность успешной сдачи экзаменов и поступления в ВУЗы.

1. Гильманшина С. И. Методологические и методические основы преподавания химии в контексте ФГОС ОО: Учебное пособие. – Казань: Отечество, Гильманшина С. И., Космодемьянская С. С. 2012. – 104 с.
2. Зайцев О.С. Методика обучения химии: теоретический и прикладной аспекты. – М.: ВЛАДОС, 2019. – 384 с.: ил.

ВОЗМОЖНОСТИ ИММУНОСЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ И ГЕКСАМОЛИБДЕНОВЫХ КЛАСТЕРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИМИПРАМИНА

А.К. Кашина^a, Э.Р. Газизуллина^a, Д.В. Брусницын^a, А.Н. Рамазанова^a, Э.П. Медянцева^a,
С.В. Федоренко^b, А.Р. Мустафина^b

^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
ФИЦ КНЦ РАН, Казань, Россия

knastyu.2011@mail.ru

В настоящее время углеродные материалы являются наиболее часто используемыми модификаторами при разработке биосенсоров.

В связи с ростом стрессовых ситуаций в мире, необходимо проведение контроля качества лекарственных препаратов на предмет обнаружения недоброкачественной и фальсифицированной продукции, в частности и трициклических антидепрессантов.

Разработаны амперометрические иммуносенсоры на основе печатных графитовых электродов, модифицированных углеродным материалом (оксидом графена и восстановленным оксидом графена в дисперсиях аминопроизводного на платформе полиэфирополиола второй генерации) и гексамолибденовых кластерных комплексов (Mo₆_SiOH_Chit_ISO) для определения трициклического антидепрессанта - имипрамина.

В качестве аналитического сигнала амперометрического иммуносенсора выбран ток окисления Mo₆_SiOH_Chit_ISO в присутствии антител против трициклических антидепрессантов.

Для оценки шероховатости поверхности применен метод атомно-силовой микроскопии, показывающий равномерное распределение модификатора на поверхности.

Оптимальными аналитическими характеристиками для количественного определения имипрамина обладает иммуносенсор с областью рабочих концентраций 1×10^{-5} – 1×10^{-9} моль/л, нижняя граница определяемых концентраций на уровне 5×10^{-9} моль/л (разведение антител 1:10).

Разработаны методики определения содержания имипрамина амперометрическими и импедиметрическими иммуносенсорами в урине и лекарственном препарате «Мелипрамин». Относительное стандартное отклонение на уровне 0.085

ИЗУЧЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ И ЭСПЛУАТАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ЭПОКСИ-БЕНЗОКСАЗИНОВЫХ СВЯЗУЮЩИХ

И.Р. Каюмов, К.А. Андрианова, Л.М. Амирова

*Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ,
Казань, Россия*

kayumov.ilyas@bk.ru

На сегодняшний день одной из актуальных задач в производстве изделий из полимерных композиционных материалов является разработка связующих с высокими технологическими и эксплуатационными свойствами. Современные высокотехнологичные отрасли, такие как авиа- и космическая промышленность предъявляют повышенные требования к материалам, а именно – увеличение механической прочности, температуры эксплуатации, а также высокая пожаробезопасность. В связи с этим поиск полимерных связующих, удовлетворяющих данным требованиям, является актуальной задачей. Одним из таких полимеров являются бензоксазины, разработка и исследование которых ведется в последние несколько десятилетий.

В данной работе рассмотрена возможность использования эпокси-бензоксазиновых соединений в качестве связующих для полимерных композиционных материалов. В качестве объектов исследования выбран ряд бензоксазинов на основе бисфенола-А и различных аминов, а также эпоксидные олигомеры разных марок. Кинетику отверждения смесевых составов исследовали методами дифференциальной сканирующей калориметрии, на основе полученных данных проведен расчет энергии активации в программном пакете Thermokinetics. Реологические характеристики смесевых составов определяли на ротационном динамическом реометре в режиме осцилляции. Температуру стеклования отвержденных композиций определяли методом динамического механического анализа.

Показано, что введение эпоксидного олигомера в состав композиции позволяет снизить температуру отверждения и повысить технологические свойства связующего. Исходя из проведенных исследований реологических и теплофизических свойств, выбраны оптимальные составы и соотношения эпокси-бензоксазиновых смесевых композиций и оптимизированы режимы их отверждения. Показана возможность их использования в роли связующих для композиционных материалов.

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАЦЕТАМОЛА И АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ЧАСТИЦАМИ МЕДИ

Д.А. Кириленко, Д.А. Коряковцева, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова

Химический институт им. А.М. Бутлерова, КФУ, Казань, Россия

dasha.kirilenko.370633@mail.ru

Парацетамол является широко используемым безрецептурным анальгетиком и входит в состав многих жаропонижающих средств, применяющихся при легкой и умеренной боли и лихорадке. Зачастую он применяется в комплексе с аскорбиновой кислотой, которая способствует общему укреплению иммунитета человека, помогает избавиться от симптомов простуды и избежать осложнений. Действие данных веществ взаимодополняют друг друга, что является причиной их совместного присутствия во многих препаратах.

На сегодняшний день возрастают риски, связанные с недобросовестностью производителей фармпрепаратов, поэтому разработка экспрессных и простых методов анализа активных компонентов является актуальной задачей. Для её решения подходит метод вольтамперометрии с химически модифицированными электродами (ХМЭ), отличающийся высокой чувствительностью, простотой выполнения анализа и относительно недорогим оборудованием.

В настоящей работе разработаны способы вольтамперометрического определения аскорбиновой кислоты (АК) и парацетамола (ПЦ) на стеклоуглеродном электроде (СУ), модифицированном частицами меди.

Установлена каталитическая активность частиц меди, осажденных на поверхность СУ, по отношению к рассматриваемым соединениям. Каталитический эффект проявляется в увеличении тока и смещении потенциалов окисления органических соединений по сравнению с немодифицированным электродом. Высота сигналов линейно связана с концентрацией ПЦ и АК в растворах.

Была оценена возможность совместного определения рассматриваемых соединений на СУ, модифицированном частицами меди. Перекрестная активность модификатора в исследуемом интервале концентраций для каждого из этих соединений отсутствует. Использование ХМЭ по сравнению с немодифицированным СУ позволяет повысить чувствительность определения и снизить нижнюю границу определяемых содержаний на 2-3 порядка.

Разработан способ вольтамперометрического детектирования ПЦ и АК при совместном присутствии. Правильность методик оценена методом введено-найдено. Относительное стандартное отклонение (S_r) не превышает 5 % во всем диапазоне исследуемых концентраций. Предложенный способ использован для количественного определения ПЦ и АК в лекарственных препаратах.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

НОВЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ 2,3-ДИЗАМЕЩЕННЫХ 2,3-ДИГИДРОТИАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИМИДИНОВ

А.А. Кожихов^a, А.С. Агарков^{a,b}, А.А. Нефедова^b, А.Ю. Петрова^a, А.С. Овсянников^b, Д.Р. Исламов^{a,b}, С.Е. Соловьева^{a,b}, И.С. Антипин^{a,b}

^a Казанский федеральный университет, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

AAKozhiov@stud.kpfu.ru

Химия гетероциклических соединений - одно из важнейших направлений органической химии. К подобным структурам относятся производные 5*H*-тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов, о модификациях которых в литературе известно мало [1-3]. Все химические свойства основаны либо на взаимодействии с достаточно сильными нуклеофильными реагентами (*SH*-кислотами и циклическими дисульфидами), либо на гидролитической неустойчивости в кислых условиях. При этом сведения о реакционной способности с *O*-нуклеофилами в литературе отсутствуют. В связи с этим был применен один из эффективных нетрадиционных методов активации - микроволновое облучение. Значительное сокращение времени и повышение выходов реакций сделали этот альтернативный источник нагрева привлекательным инструментом в химическом синтезе, который, к тому же, соответствует большинству концепций «зелёного» синтеза [4].

Данная работа посвящена получению новых 2-арилметиленовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, подробному изучению структуры полученных соединений, а также их взаимодействию с метиловым спиртом в присутствии основания в условиях микроволнового активации.

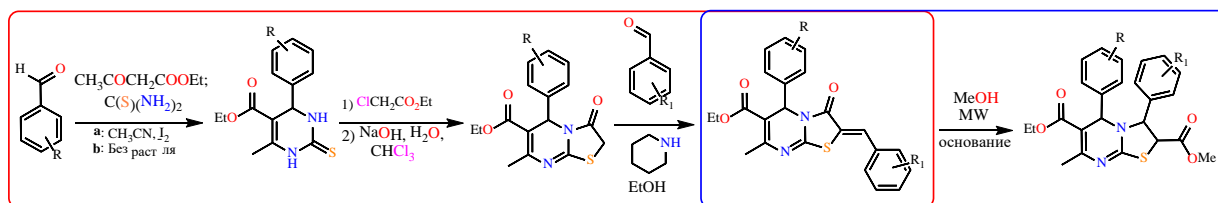


Рисунок 1 – Стратегия синтеза целевых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов (красная рамка) и их взаимодействие с метанолом в условиях микроволнового излучения (синяя рамка).

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной ФИЦ КазНЦ РАН для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

1. Nagarajaiah H.M., Khazi I.A., Begum N.S. *J. Chem. Sci.*, **2015**, 127(3), 467-479.
2. Zhao D., Chen C., Liu H., Zheng L., Tong Y., Qu D., Han S. *Eur. J. Med. Chem.*, **2014**, 87, 500-507.
3. Jin C.H., Jun K.Y., Lee E., Kwon Y., Kim K., Na Y. *Bioorg. & Med. Chem.*, **2014**, 22(17), 4553-4565.
4. Fairoosa J., Saranya S., Radhika S., Anilkumar G. *ChemistrySelect*, **2020**, 5(17), 5180–5197.

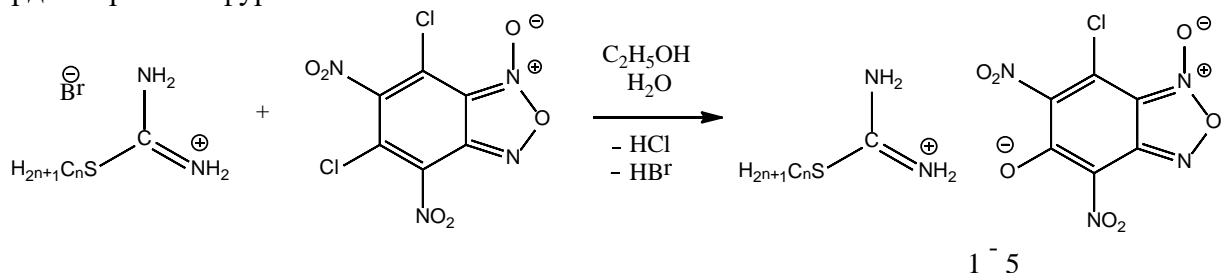
УЛУЧШЕННЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ИЗОТИУРОНИЕВЫХ СОЛЕЙ 5,7-ДИНИТРО-4,6-ДИХЛОРБЕНЗОФУРОКСАНА

Е.В. Колпакова, Д.И. Бахтияров, Л.М. Юсупова, А.В. Герасимов, И.В. Галкина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

argironet@gmail.com

Разработан новый способ получения изотиуруниевых солей дихлординитробензофураксана.



$$n = 10, 12, 14, 16, 18$$

Реакции 4,6-дихлор-5,7-динитробензофураксана с солями изотиуруния в очищенном этаноле протекали в течение трех недель при комнатной температуре в чашках Петри с образованием ярко-желтых игольчатых кристаллов изотиуруниевых солей 7-хлор-4,6-динитро-5-оксидобензофураксана (1-5). Вышеприведённая схема иллюстрирует соответствующие реакции. Структуру полученных кристаллов определяли методами ИК- и ЯМР-спектроскопии, элементного анализ. Термическую стабильность изучали методами одновременной термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии. Синтезированные соли 1 - 5 отданы на изучение биологической активности.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К РАЗВИТИЮ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ГРАМОТНОСТИ ШКОЛЬНИКОВ

Ш. Гарягдыев, А. Комяков, А.З. Гайфуллина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

agajfullina@ya.ru

Актуальность. В цикле исследования PISA-2018 среди 79 участников Российская Федерация заняла 33 место по естественнонаучной грамотности, 30 место по математической грамотности, 31 место по читательской грамотности. Российские и международные исследования показывают, что многие российские школьники обладают значительным объёмом знаний, однако грамотно пользоваться этими знаниями они не умеют. Как только в задаче описывается реальная или приближенная к реальной ситуация, приводятся дополнительные данные, часть из которых не используется при решении задачи, информация представляется в различной форме (в виде текста, таблиц, графиков), то ее решение вызывает значительные трудности у учащихся! Цель – попасть в 10-ку стран по качеству образования!

Определение функциональной грамотности в исследовании PISA заложено в основном вопросе, на который отвечает исследование: «Обладают ли учащиеся 15-летнего возраста, получившие обязательное общее образование, знаниями и умениями, необходимыми им для полноценного функционирования в современном обществе, т.е. для решения широкого диапазона задач в различных сферах человеческой деятельности, общения и социальных отношений?» [1]

Материалы и методы. Как показывает практика преподавания, формирование функциональной грамотности ускоряется при использовании в преподавании практико-ориентированного опыта деятельности, определяемый методами компетентностного и деятельностного подходов, ориентированных, прежде всего, на достижение конкретных результатов. Основные этапы формирования функциональной грамотности: создание образовательных маршрутов (дорожных карт) в соответствии с разделами программы; разработка методических рекомендаций; подборка диагностического инструментария.

Результаты и обсуждение. Функциональную грамотность школьников можно интересно развивать на уроках химии, например, как игровой момент на уроке; как проблемный элемент в начале урока; как задание – «толчок» к созданию гипотезы для исследовательского проекта; как задание для смены деятельности на уроке; как модель реальной жизненной ситуации, иллюстрирующей необходимость изучения какого-либо понятия на уроке; как задание, устанавливающее межпредметные связи в процессе обучения и так далее. Были выявлены приемы использования такой методики. Некоторые задания помогают сформулировать обучающимся свою точку зрения и найти аргументы для её защиты. Также можно собрать задания одного типа и провести урок в соответствии с определенной образовательной технологией и задания такого типа можно включать в школьные олимпиады, различные викторины.

Материалы и полученные результаты методики формирования функциональной грамотности на уроках химии могут быть использованы на практике студентами и педагогами различных школ.

1. PISA 2018 Assessment and Analytical Framework. Paris: OECD Publishing, 2019. 308 p.

НИТРИЛЫ КАК ИСТОЧНИК АМИДНОГО ФРАГМЕНТА В ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЯХ С-Н АМИДИРОВАНИЯ

А.И. Кононов^{a,b}, С.О. Стрекалова^a, Ю.Г. Будникова^{a,b}

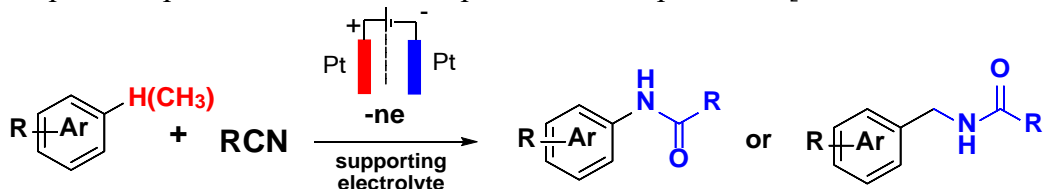
^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

^b Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

kononovsnz97@gmail.com

Синтез *N*-ариламидов представляет особый интерес для химиков-органиков, поскольку ароматические амиды (анилиды) являются важными структурными каркасами, представленными в природных продуктах, биологических соединениях, фармацевтических препаратах и синтетических материалах [1]. Поэтому большой интерес для химиков представляет поиск новых методов синтеза *N*-ариламидов, соответствующих критериям «зеленой» химии и протекающих в мягких условиях (комнатная температура, без сильных окислителей и добавок). Электросинтез является одним из таких подходов.

Была проведена серия реакций сочетания различных (гетеро)ароматических соединений с нитрилами в электрохимических мягких условиях, изучены редокс свойства используемых в реакции субстратов. Предложен механизм протекающих процессов [2-3].



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 22-13-00017.

1. Wang X., Liu J., An G. *Tetrahedron Lett.*, **2020**, 61(43), 152327.
2. Strekalova S., Kononov A., Rizvanov I., Budnikova Y. *RSC Adv.*, **2021**, 11, 37540-37543.
3. Strekalova S., Kononov A., Budnikova Y. *Tetrahedron Lett.*, **2022**, 102, 153917.

ОБРАЗОВАНИЕ СИНИЛЬНОЙ КИСЛОТЫ В РЕАКЦИИ АЦЕТОНИТРИЛА С МЕТИНОВЫМ РАДИКАЛОМ В УСЛОВИЯХ РАЗРЕЖЕННОЙ МЕЖЗВЁЗДНОЙ СРЕДЫ

Л.И. Крикунова^{a,b}, Д.П. Порфирьев^{a,b}, В.Н. Аязов^{a,b}

^a Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С.П. Королёва (Самарский университет), Самара, Россия

^b Самарский филиал физического института им П.Н. Лебедева РАН, Самара, Россия

lubov_markova@inbox.ru

Повсеместно обнаруженные в космосе молекулы нитрилов способны к реакциям с образованием сложных органических соединений и в ряде случаев ведут к получению азотистых оснований – строительных блоков в цепочках ДНК [1]. В результате исследования химической реакции молекулы CH_3CN с радикалом CN в условиях холодного космоса при энергии столкновения молекул, не превышающей 10,0 ккал/моль построена поверхность потенциальной энергии (ППЭ), включающая наиболее энергетически выгодные пути. Оптимизированы геометрии реагентов, интермедиатов, переходных состояний, и продуктов реакции, а также найдены колебательные частоты с использованием гибридного метода теории функционала плотности $\omega\text{B97xd/cc-pVTZ}$ [2,3,4]. Расчет кинетических констант и коэффициентов ветвления продуктов произведен в рамках теории Райса-Рампергера-Касселя-Маркуса (РРKM) в пределе нулевого давления [5,6]. Точность значений энергий на ППЭ составляет 1 ккал/моль [7]. Данные, полученные в пределе одиночных столкновений, свидетельствуют о преобладании линейных продуктов и, в частности, наибольший выход в реакции имеет молекула синильной кислоты. Нельзя исключать так же из рассмотрения сопутствующие радикалы, единичные столкновения с которыми так же представляют интерес для астрохимии.

Работа выполнена при поддержке гранта No. 075-15-2021-597 («Происхождение и эволюция органических молекул в нашей галактике»).

1. S.L. Miller, H.C. Urey, Science journal. 1959, 130, 245.
2. J.-D. Chai, M. Head-Gordon, Physical Chemistry Chemical Physics. 2008,10, 6615.
3. J.-D. Chai, M. Head-Gordon, Physics Chemical Journal. 2008, 128, 084106.
4. T.H. Dunning, The Journal of Chemical Physics. 1989, 90, 1007.
5. H. Eyring, S.H. Lin, S.M. Lin, Basic Chemical Kinetics, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1980.
6. R.A. Marcus, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences. 1990, 332, 283.
7. J. Zhang, E.F. Valeev, Journal of Chemical Theory and Computation. 2012, 8, 3175.

ОРГАНИЗАЦИЯ САМООБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ НА УРОКАХ ХИМИИ

А.А. Кузекенова, А.Р. Камалеева

Химический институт им. А.М. Бутлерова (КФУ), Казань, Россия

finakuzekenova09@gmail.com

В современном обществе становится все более очевидным то, что следование только методам традиционного образования не является эффективным, а иногда и замедляет процесс развития обучающегося. Отсюда следует, для того, чтобы успевать за меняющимися темпами развития технологий, возникает необходимость дополнительно обучаться самостоятельно.

Целью исследования стало формирование самообразовательных умений и навыков у обучающихся средних классов, опираясь на выбранные методы, и экспериментально доказать эффективность системы работы. Методы исследования: 1) анализ и синтез научно-методической литературы; 2) классификация изученной информации; 3) наблюдение; 4) эксперимент; 5) опросы и анкетирование.

Перед реализацией эксперимента было проведено анкетирование, направленное на изучение уровня развития самообразовательных умения и навыков учащихся восьмых классов.

Первое анкетирование, направленное на изучение активности обучающихся во время уроков химии, показало невысокий уровень заинтересованности в участии на уроках химии. Об этом говорит более 40% опрошенных, выбравших вариант ответа «Редко», отвечая на вопрос «Как часто вы проявляете активный интерес на уроках химии?».

В ходе изучения сравнительных результатов сформированности самообразовательных умений и навыков экспериментальной и контрольной групп открыли – уровень сформированных самообразовательных умений и навыков невысок.

В процессе формирующего этапа были использованы такие самообразовательные методы, как:

- самостоятельная работа с теоретическими источниками;
- самостоятельный анализ аудиовизуальных средств обучения;
- самостоятельное проведение практических работ;
- самооценивание;
- организация самостоятельной работы.

В результате проведенного эксперимента в экспериментальной группе уровень самообразовательных умений и навыков повысился в среднем на 20%.

За счет целенаправленной работы и применения методов самообучения в экспериментальном классе получилось повысить в значительной степени уровень развития самообразовательных умений и навыков по химии учеников средней школы.

1. А.Р. Галустов. Проблема самообразования в современных педагогических исследованиях // Культурная жизнь Юга России. 2011. №3(41). С. 11 – 14.
2. Мазитова Р.И. САМОВОСПИТАНИЕ И САМООБРАЗОВАНИЕ ЛИЧНОСТИ // Общая педагогика. 2014. №26. С. 11 – 15

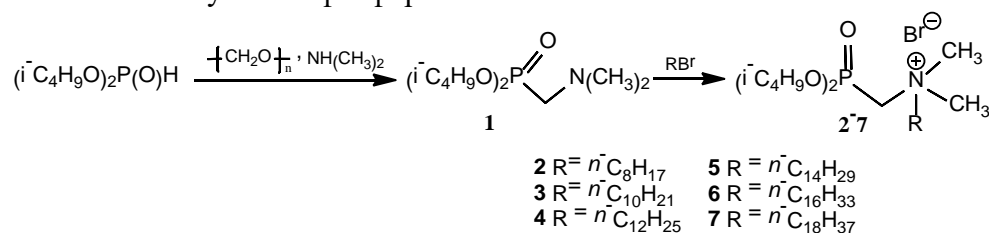
СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ

Н.О. Кузнецов, А.М. Гайнеев, Р.Р. Давлетшин

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

nikai fon@yandex.ru

Одними из наиболее широко используемых антисептиков и дезинфектантов являются четвертичные аммониевые соли (ЧАС) и их производные. Нами была разработана двухстадийная методика синтеза фосфорилированных четвертичных аммониевых солей, содержащих изобутильные заместители у атома фосфора.



Полученные соединения **2-7** были проверены на наличие антибактериальной активности против грамположительных бактерий и грамотрицательных штаммов и грибов *Candida albicans*.

Таблица 1 – Данные антимикробной активности соединений **2-7**

Соединение ¹	Величина зоны задержки роста, через 24 часа d (мм)				
	<i>E. coli</i>	<i>B. cereus</i>	<i>Ps. aeruginosa</i>	<i>S. aureus</i>	<i>Candida albicans</i>
2	17	24	9	28	18
3	23	30	15	32	25
4	18	23	16	24	22
5	12	15	11	16	15
6	-	-	-	7	7
7	-	-	-	-	-
Хлорид бензалкония ²	8	15	11	13	10
Нафтифин гидрохлорид ³	н/о	н/о	н/о	н/о	12

¹- Эксперименты выполнены с использованием 1% раствора фосфорилированных ЧАС **2-7** в ДМСО

² - 1% водный р-р

³ - 1% спиртовой р-р, торговое название Микодерил; н/о – активность не определялась

Установлена высокая антибактериальная активность соединений **2** и **3** по отношению к *B. cereus*,

S. aureus и *E. coli*. Введение гексадецильного и октадецильного заместителя к четвертичному атому азота (соединения **6** и **7**) приводит к критическому снижению активности фосфорилированных ЧАС.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)

1. Bureš F. *Topics in Current Chemistry*, **2019**, 377, 1-21.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА СИНТЕЗА ТРИС(4-МЕТИЛ-ФЕНИЛ)ФОСФИНА ИЗ 1-МЕТИЛ-4-ФТОРБЕНЗОЛА И КРАСНОГО ФОСФОРА

А.А. Кузнецова^a, Д.В. Чачков^b, С.Ф. Малышева^c, Я.А. Верещагина^a

^a Химический институт им. А.М. Бутлерова, КФУ, Казань, Россия

^b Казанское отделение Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН – филиал Федерального государственного учреждения «Научно-исследовательский институт системных исследований РАН», Казань, Россия

^c ФГБУН «Иркутский институт химии имени А.Е. Фаворского СО РАН», Иркутск, Россия

kuznetsovaanastan@gmail.com

Фосфины и фосфинхалькогениды с тремя объёмными арильными заместителями широко применяются в качестве лигандов для металлокомплексов, проявляющих биологическую активность [1], люминесцентные и каталитические свойства. [2, 3]. В последнее время разрабатываются новые методы синтеза востребованных фосфиновых лигандов в соответствии с принципами «зелёной» химии, в частности, получение триарилфосфинов из красного фосфора и арилгалогенидов в сверхосновной среде [4].

В настоящей работе осуществлено изучение механизма реакции получения трис(4-метилфенил)фосфина из 1-метил-4-фторбензола и красного фосфора с использованием метода DFT ВЗРW91/TZVP. Предварительно был проведён конформационный анализ триарилзамещённого фосфина. Реакция инициируется безбарьерным присоединением гидроксид-аниона к фосфору, при этом происходит разрыв связи Р–Р. На следующем этапе 1-метил-4-фторбензол взаимодействует с полифосфидным анионом. Арильные заместители присоединяются к атому фосфора последовательно, при этом каждая последующая стадия характеризуется более низким энергетическим барьером.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 20-03-00119.

1. Khan S.Z., Zia-ur-Rehman, Butler I.S. et al. *Inorg. Chem. Commun.* 2019, **105**, 140–146.
2. Liang P., Kobayashi A., Sameera W.M.C. et al. *Inorg. Chem.* 2018, **57**, 5929–5938.
3. Barbato C., Baldino S., Ballico M. et al. *Organometallics.* 2018, **37**, 65-77.
4. Malysheva S.F., Kuimov V.A., Belogorlova N.A. et al. *Eur. J. Org. Chem.* 2019, 6240–6245.

СОРБЕНТ НЕФТИ И НЕФТЕПРОДУКТОВ ИЗ ПОЛИЭТИЛЕНОВЫХ ОТХОДОВ

Т.И. Кузнецова^a, Е.С. Охотникова^b, Ю.М. Ганеева^b, Г.Р. Фазылзянова^b

^a ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

21m.kuznetsovati@fnnh.ru

Среди существующих способов удаления нефти из воды, одним из наиболее эффективных принято считать использование сорбентов. Применение сорбирующих материалов на основе полиэтиленовых отходов является привлекательным методом борьбы с загрязнением нефтяными разливами, в основном благодаря более низким затратам на их получение, их высокой эффективности и возможности повторного использования (регенерации)[1].

В ходе работы получен порошок из вторичных полиэтиленов высокой плотности (ПЭВП), низкой плотности (ПЭНП), а также линейного полиэтилена низкой плотности (ЛПЭНП). Проверена возможность его использования в качестве сорбента нефти и нефтепродуктов. Определены такие характеристики как: размер частиц, насыпная плотность, плавучесть, водо- и нефтепоглощение. Размер частиц и насыпная плотность получаемого порошка увеличиваются в ряду ПЭВП→ПЭНП→ЛПЭНП. Плавучесть всех порошков составила более 72 ч. Водопоглощение порошков составило порядка 0,06 г/г, нефтепоглощение – порядка 4 г/г, что сопоставимо с уровнем промышленных аналогов. Также сорбенты выдерживают динамическое испытание на адсорбируемость воды.

Полученные результаты показали возможность использования полиэтиленовых порошков в качестве сорбентов нефти и нефтепродуктов, а также возможность повышения сорбционной емкости за счет вариации типа полиэтилена и дисперсности полиэтиленового порошка.

1. Egle Anuzyte, Vaidotas Vaisis, Natural oil sorbents modification methods for hydrophobicity improvemens. Energy Procedia, 2018, vol. 147, no. 18, pp. 295-300.

ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АЛАНИНА, ВАЛИНА И ФЕНИЛАЛАНИНА В ЩЕЛОЧНЫХ РАСТВОРАХ С ПОМОЩЬЮ МЕМБРАН МФ-4СК, МОДИФИЦИРОВАННЫХ КАРБОКСИЛИРОВАННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

В.А. Кулешова^a, Т.С. Колганова^a, Е.Ю. Сафронова^b, А.В. Паршина^a, О.В. Бобрешова^a

^a Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

^b Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук, Москва, Россия

vik.kuleshova2017@mail.ru

Аминокислоты рассматривают в качестве актуальных аналитов, так как они являются нутриентами и маркерами различных заболеваний, а также представляют собой модельные объекты для исследования влияния размера и природы радикала органических ионов на характеристики их определения разрабатываемыми методами. В данной работе исследованы перфторированные сульфокатионообменные мембраны МФ-4СК, содержащие 0.5–1.0 мас. % углеродных нанотрубок с карбоксильными группами на поверхности. На их основе разработаны мультисенсорные системы для совместного определения аминокислот и катионов K^+ в водных растворах при рН от 8 до 10 в диапазоне концентраций от 1.0×10^{-4} до 5.0×10^{-2} М [1].

Различия в перекрестной чувствительности сенсоров на основе исходной и модифицированных мембран, необходимые для их использования в мультисенсорных системах, достигнуты за счет изменения микроструктуры мембран и появления новых реакционных центров, по-разному влияющих на условия необменной сорбции алифатических и ароматической аминокислот. Для совместного определения анионов, цвиттер-ионов аминокислот и катионов K^+ разработаны мультисенсорные системы на основе исходной мембраны МФ-4СК и мембраны, содержащей 0.5 или 1.0 мас. % наночастиц УНТ- COO^- .

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации, грант № МД-5732.2021.1.3

1. Zardini H.Z., Amiri A., Shanbedi M., Maghrebi M. *et al.* Enhanced antibacterial activity of amino acids-functionalized multi walled carbon nanotubes by a simple method // *Colloids Surf. B.* 2012. V. 92. P. 196.

МУЛЬТИСЕНСОРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ МЕМБРАН МФ-4СК, СОДЕРЖАЩИХ КАРБОКСИЛИРОВАННЫЕ И СУЛЬФИРОВАННЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ, ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СУЛЬФАНИЛАМИДОВ

В.А. Кулешова^а, А.С. Ельникова^б, П.А. Юрова^б, А.В. Паршина^а, О.В. Бобрешова^а

^а Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

^б Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук,
Москва, Россия

vik.kuleshova2017@mail.ru

Сульфаниламидные препараты широко используют в медицине и ветеринарии. Для их анализа перспективными представляются электрохимические сенсоры, в частности потенциометрические [1]. Разработка последних затруднена в связи с ограниченностью материалов селективных по отношению к анионам. Решением данной проблемы может быть использование мультисенсорного подхода, в котором перекрестная чувствительность сенсоров, объединенных в массив, компенсируется применением многомерных математических методов обработки данных.

В качестве градуировочных исследовали растворы сульфаниламида, сульфацида, сульфаметоксазола и NaOH. Концентрации компонентов варьировали в диапазоне от $1.0 \cdot 10^{-5}$ до $1.0 \cdot 10^{-3}$ М. Методом отливки получены мембраны МФ-4СК с градиентным распределением углеродных нанотрубок (УНТ), поверхностно модифицированных карбоксильными группами (УНТ-COO⁻) и сульфогруппами (УНТ-SO³⁻), с содержанием допанта 0.5, 1.0, 1.5 масс.%. Особенность получения данных образцов – ультразвуковая обработка смеси раствора полимера и допанта перед отливкой. Для совместного определения анионов сульфаниламидов и катионов Na⁺ были объединены в массив пары перекрестно чувствительных ПД-сенсоров. Разработанные мультисенсорные системы апробированы для анализа модельных растворов и фармацевтических препаратов.

1. El-Ragehy N.A., Hegazy M.A. et al. Validated potentiometric method for the determination of sulfacetamide sodium; application to its pharmaceutical formulations and spiked rabbit aqueous humor // Bulletin of Faculty of Pharmacy, Cairo University. 2018. V. 56. №. 2. P. 207-212.

СИНТЕЗ АРЕНОФОСФЕПИНОВ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИЙ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОКСИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С ИМИНАМИ

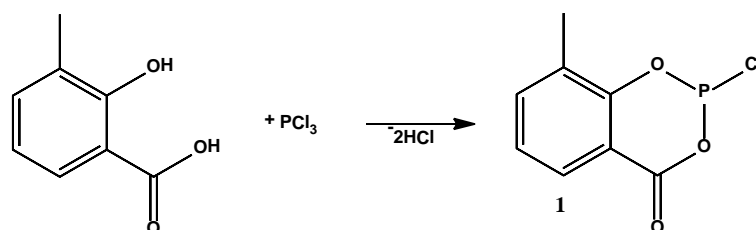
А.А. Куприянова, Г.А. Ивкова, В.Ф. Миронов

Казанский федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

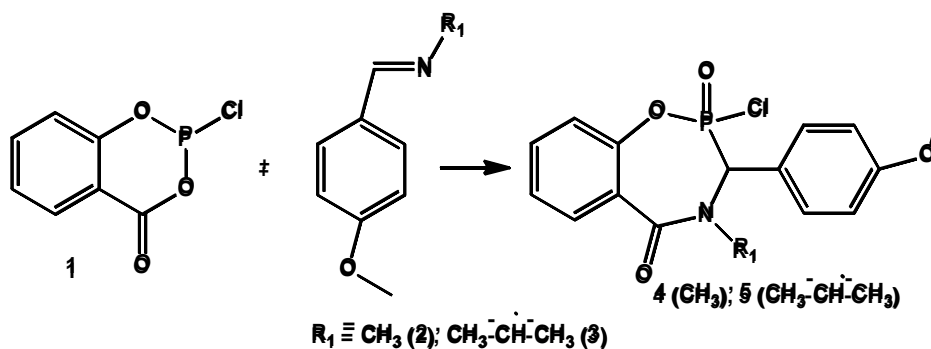
delyakupriyanova@gmail.com

Цель работы: разработка новых методов синтеза аренофосфепинов на основе реакций фосфорилированных производных гидроксикарбонновых кислот с имидами.

Нами впервые был синтезирован 2-хлор-8-метил-бензо[*d*]-1,3,2-дифосфорин-4-он (1) из 2-гидрокси-3-метилсалициловой кислоты. Структура соединения подтверждена методами ЯМР ^{31}P , ИК, ЯМР ^1H , ^{13}C и $^{13}\text{C}\{-^1\text{H}\}$.



При взаимодействии фосфита (1) с имидами (2,3) нами установлено образование семичленных гетероциклов – аренофосфепинов (4,5). Прохождение реакций контролировалось методом ЯМР ^{31}P . Отличия в реакционной способности позволили нам высказать суждения о механизме протекания процесса.



Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ СУЛЬФАНИЛАМИДОВ С ПОМОЩЬЮ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ

С.Е. Лапук, А.В. Герасимов, Т.А. Мухаметзянов, Р.Н. Нагриманов, А.Е. Климовицкий

Казанский (Приволжский) федеральный университет, химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

lapuksemen@gmail.com

Надежное определение параметров, определяющих стабильность аморфных форм лекарств, является одной из ключевых задач современной фармацевтики. Кинетическая стабильность таких систем чрезвычайно важна, поскольку влияет на их практическое применение. В настоящей работе с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии были определены критические скорости охлаждения, кинетическая хрупкость и кинетические параметры холодной кристаллизации четырех медленно кристаллизующихся сульфаниламидов – сульфагуанидина, сульфациназида, сульфалена и сульфадимидина. Было установлено, что изученные сульфаниламиды являются умеренно хрупкими стеклообразователями. Было показано, что модель Накамуры обладает хорошей прогностической способностью, поскольку позволяет определить временной профиль стабильности лекарственных систем, склонных к кристаллизации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-23-00312, <https://rscf.ru/project/22-23-00312/>.

ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОЁМКОСТИ ГОМО- И СОПОЛИМЕРОВ ПРОПИЛЕНА С ЭТИЛЕНОМ ОТ ИХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ

И.С. Ларионов^{a,b}, Д.А. Балькаев^b, Л.М. Амирова^{a,b}

^a *Казанский национальный исследовательский технический университет – КАИ
им. А.Н. Туполева, Казань, Россия*

^b *Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*

larionov_igor1999@mail.ru

Полипропилен является термопластом широкого назначения, нашедшим применение во многих отраслях благодаря комплексу ценных свойств, в том числе и низкой рыночной стоимости и крупнотоннажному производству. Одной из важных характеристик материала, определяющей область его применений является теплоёмкость. Понимание влияния строения макромолекул и фазового состава полимера на теплоёмкость имеет ценность при разработке новых марок сополимеров.

В различных исследованиях уже проводились попытки найти связь между теплоёмкостью и составом смеси, строением молекулы или фазовым составом как высоко, так и низкомолекулярных соединений [1,2]. Однако в литературе мало данных сравнения теплоемкостей гомополимеров с их различными сополимерами.

В представленной работе исследован ряд промышленных марок гомополимеров полипропилена, статистических и блочных сополимеров пропилен-этилен. Исследования проводились на дифференциально сканирующем калориметре DSC 214 Polyma (Netzsch) в диапазоне температур от -40 до 106 °С.

В результате исследования найдена взаимосвязь между теплоёмкостью полимера и его молекулярной структурой. Гомополимеры как правило имели более низкую теплоёмкость чем блок-сополимеры, а теплоёмкость статистических сополимеров возрастала намного быстрее с повышением температуры, чем у других марок.

1. Wunderlich B., Jones L. D. Heat capacities of solid polymers //Journal of Macromolecular Science, Part B. – 1969. – Т. 3. – №. 1. – С. 67-79.
2. Mathot V. B. F., Pijpers M. F. J. Heat capacity, enthalpy and crystallinity of polymers from DSC measurements and determination of the DSC peak base line //Thermochimica acta. – 1989. – Т. 151. – С. 241-259.

АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ ИММУНОСЕНСОРЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЛХИЦИНА, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ВОССТАНОВЛЕННЫМ ОКСИДОМ ГРАФЕНА

Н.Ю. Лопатко, Е.А. Перескокова, Р.М. Бейлинсон, Э.П. Медянцева

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

nlopatko82@gmail.com

Колхицин – алкалоид, выделяющийся из экстракта безвременника осеннего и применяющийся для лечения таких болезней, как подагры, болезни Бехчета, семейной средиземноморской лихорадки. Однако его применение ограничено широким спектром побочных действий: почечных, церебральных, желудочно-кишечных, и, в конечном итоге - летальным исходом.

Были разработаны иммуносенсоры на основе графитовых печатных электродов, на поверхности которого была произведена соиммобилизация фермента тирозиназы и иммунореакта (Ат против колхицина), поскольку было установлено, что колхицин не является эффектором этого фермента.

Варьирование разведения антител (1:1, 1:10, 1:100) показало, что наиболее широкий диапазон определяемых концентраций и лучшие аналитические характеристики разрабатываемых сенсоров наблюдаются при разведении 1:10. Поэтому все дальнейшие измерения проводились при данном разведении антител. Установлено, что в присутствии колхицина наблюдается увеличение значения аналитического сигнала – тока окисления субстрата в концентрационном диапазоне 10^{-11} - 10^{-6} М с $c_H = 5 \times 10^{-12}$ М. Максимальный процент активации составил 53,8%, $R^2 = 0,9655$.

Поверхность разработанных иммуносенсоров была модифицирована восстановленным оксидом графена (ВГО), что позволило улучшить некоторые аналитические характеристики сенсоров, в частности, чувствительность, коэффициент корреляции ($R^2 = 0,9995$) и максимальный процент активации (73,4%). При этом диапазон определяемых концентраций практически не изменился - 10^{-11} - 10^{-6} М ($c_H = 7 \times 10^{-12}$ М).

Полученные результаты показывают перспективность применения разработанных иммуносенсоров как датчиков для определения остаточных количеств колхицина в биологических жидкостях.

ВЛАЖНОСТНОЕ И ТЕРМИЧЕСКОЕ РАСШИРЕНИЕ ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРОВ С РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНЬЮ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Г.М. Мадиярова, О.Л. Хамидуллин, Д.Р. Сафиуллин

*Казанский национальный исследовательский технический университет
им. А. Н. Туполева – КАИ, Казань, Россия*

gulnazka_madiyarova@mail.ru

В настоящее время в аэрокосмической промышленности широкое применение получили композиционные материалы, способные выдерживать экстремальные перепады температур. Поэтому при создании конструкций из полимерных композиционных материалов (ПКМ) особое значение имеют характеристики линейного термического расширения, характеризующиеся изменением размеров из-за разности коэффициента линейного термического расширения (КЛТР) между матрицей и армирующим материалом, а также подверженностью матричного материала воздействию влаги [1-2]. Коэффициент термического расширения оказывает существенное влияние на поведение и эксплуатационные характеристики композитных конструкций. Для использования полного потенциала полимерного композитного материала, важным является изучение реакции эпоксидного полимера на влажную среду. Сорбированная влага в изделии из ПКМ приводит к ухудшению его механических и прочностных характеристик.

В ходе работы экспериментально определены КЛТР эпоксидных полимеров на основе ряда эпоксиноволачных смол с различной функциональностью и аминного отвердителя в широком диапазоне температур. Влияние влаги на расширение образцов определялось при сравнении КЛТР водонасыщенных и высушенных образцов. Анализируется коэффициент влажностного расширения и параметры процесса сорбции воды полимерами с различной степенью полимеризации на основе ряда эпоксиноволачных смол.

1. Krauklis, A.E. and A.T.J.P. Echtermeyer, Mechanism of yellowing: Carbonyl formation during hygrothermal aging in a common amine epoxy. 2018. 10(9): p. 1017.
2. Yang, Y., et al., Thermal aging of an anhydride-cured epoxy resin. 2015. 118: p. 111-119

ПОЛИМЕРНЫЙ НАНОНОСИТЕЛЬ НА ОСНОВЕ 1-АЛЛИЛТИМИНА ДЛЯ ДОСТАВКИ ДОКСОРУБИЦИНА В КЛЕТКИ ГЛИОБЛАСТОМЫ

Э.Э. Мансурова^a, А.Д. Волошина^b, М.М. Шулаева^b, И.Р. Низамеев^c, А.П. Любина^b,
С.К. Амерханова^b, М.К. Кадиров^b, Л.Р. Бахтиозина^a, А.Ю. Зиганшина^b,
В.Э. Семенов^b, И.С. Антипин^a

^a Химический институт им. А. М. Бутлерова, КФУ, Казань, Россия;

^b Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова, Казань, Россия

^c КНИТУ-КАИ им. А. Н. Туполева, Казань, Россия;

elinamans17012@gmail.com

Неселективное действие противораковых препаратов на пораженные клетки провоцируют побочные эффекты и неудовлетворительные клинические результаты при проведении химиотерапии. Наноносители на основе биологически активных соединений способны не только адресно доставлять лекарственные средства, но и увеличивать их терапевтическую активность, понижая при этом влияние на здоровые клетки [1].

В работе представлены полимерные глутатион-чувствительные наноразмерные частицы, полученные в ходе реакции микроэмульсионной полимеризации 1-аллилтимина и диаллилдисульфида. Урацил и его модифицированные структуры являются широко известными биологическими соединениями, которые способны улучшать фармакологическую активность противоракового препарата доксорубицина [2]. Диаллилдисульфид в ходе полимеризации образует монолитное ядро, в которое помещали препарат доксорубицина. Он также участвует в окислительно-восстановительных процессах при распаде наноносителей под действием глутатиона в среде клетки. Биологические исследования показали, что комбинация доксорубицина и наноносителя гораздо более цитотоксична для клеток глиобластомы (T98G), чем для раковых клеток M-Nela и здоровых клеток печени. По данным проточной цитометрии и флуоресцентной микроскопии наноноситель улучшает проникновение доксорубицина в клетки T98G и ускоряет их гибель.

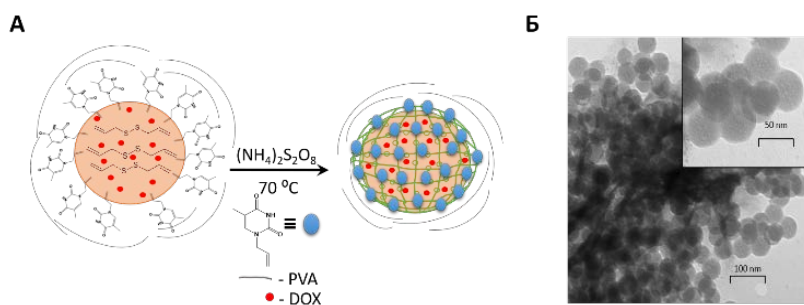


Рисунок 1 – (А) Схема синтеза полимерного наноносителя на основе 1-аллилтимина с инкапсулированным доксорубицином; (Б) снимок ПЭМ.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (№ 0671-2020-0063).

1. Kenchegowda M., Rahamathulla M., Hani U., Begum M. Y., Guruswamy S., Osmani R. Ali M., Gowrav M. P., Alshehri S., Ghoneim M. M., Alshlowi A., Gowda D. V. *Molecules*, **2022**, 27, 146.
2. Pałasz A., Cież D. *European Journal of Medicinal Chemistry*, **2015**, 97, 582–611.

2-АЛКЕНИЛФЕНОЛЫ В РЕГИОДИВЕРГЕНТНОМ СИНТЕЗЕ ФОСФАКУМАРИНОВ И ОКСАФОСФОЛЕНОВ

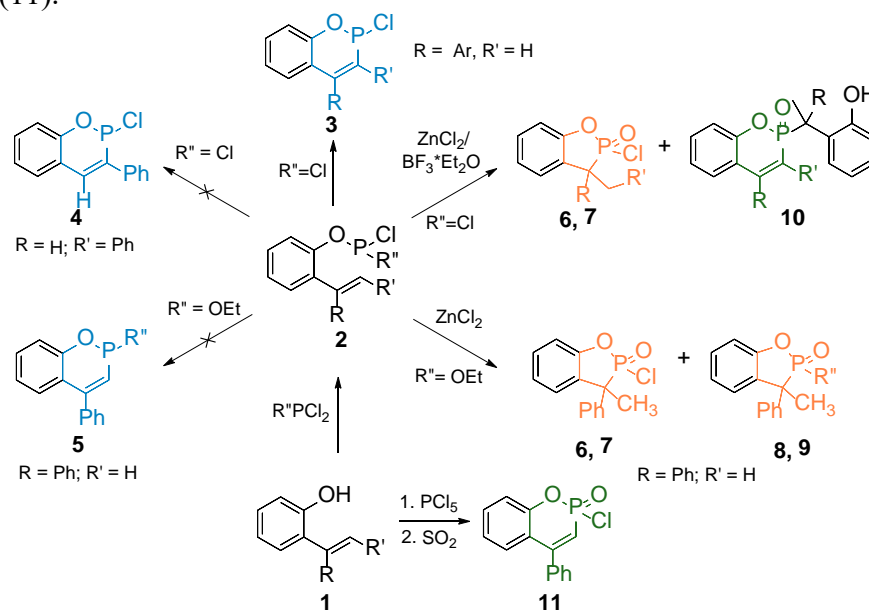
Э.А. Микуленкова^{a,b}, Д.А. Татаринов^{a,b}, В.Ф. Миронов^{a,b}

^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

^b Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

elinamikulenkovagg@gmail.com

В данной работе предложен дивергентный синтез фосфакумаринов и бензооксафосфоленов из 2-гидроксистиролов. Нами было обнаружено, что образующиеся в ходе реакции 2-алкенилфенолов (1) с трихлоридом фосфора ациклические фосфиты (2) при нагревании циклизируются в фосфакумарины (3). При этом в реакциях β -фенилзамещенного стирола с PCl_3 , а также при взаимодействии этилдихлорфосфита с 2-гидроксистиролом образование фосфоринов (4,5) не происходит и реакция останавливается на этапе образования фосфитов (2). При катализе кислотами Льюиса ($ZnCl_2$) основным направлением реакции производных P(III) со стиролом (1) является образование бензооксафосфоленов в виде смеси диастереомеров (6-9). При этом также было обнаружено образование побочного продукта – фосфорина (10). Взаимодействие 2-алкенилфенолов (1) с пентахлоридом фосфора приводит в свою очередь к образованию фосфакумарина (11).



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-01134, <https://rscf.ru/project/22-23-01134/>

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 2-АРИЛГИДРАЗОНОВ ТИАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИМИДИНА

Д.О. Мингажетдинова^а, А.С. Агарков^{а,б}, А.А. Нефедова^б, Э.Р. Габитова^а,
Д.А. Третьякова^а, И.А. Литвинов^б, С.Е. Соловьева^б, И.С. Антипин^а

^а Казанский федеральный университет, Казань, Россия

^б Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

doming01@mail.ru

В производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидин-3-она есть активный метиленовый фрагмент, обладающий высокими *СН*-кислотными свойствами, позволяющими получать различные производные в результате реакции конденсации с электрофильными реагентами. Образованные таким образом соединения являются перспективными структурными фрагментами в разработке новых лекарственных препаратов, обладающих противомикробными, противовоспалительными и антибактериальными свойствами [1]. Данная работа посвящена синтезу, изучению структуры и биологических свойств производных 2-арилгидразонов тиазоло[3,2-*a*]пиримидина (Рисунок 1).

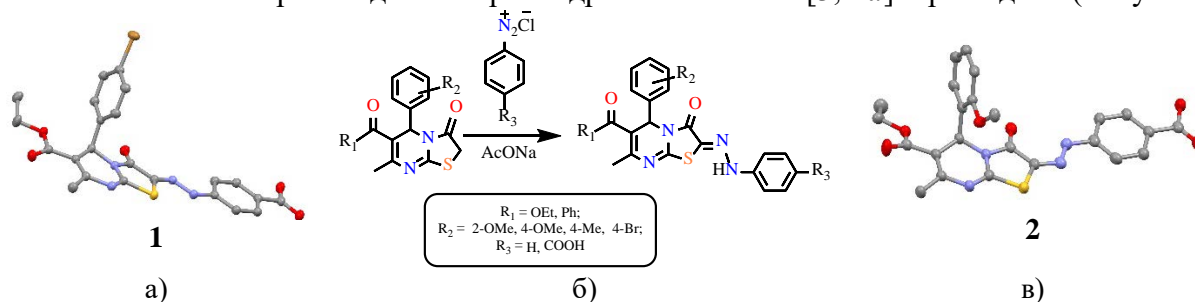


Рисунок 1 – а) Геометрия соединения **1** в кристалле, б) схема синтеза 2-арилгидразоновых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, в) геометрия соединения **2** в кристалле.

Для синтезированных соединений характерна азо-гидразонная таутомерия и возможность наличия двух геометрических изомеров (*E*- и *Z*-). Методом РСА и ¹Н ЯМР спектроскопией установлено, что как в растворе, так и в кристаллической фазе образуется только гидразонная форма, а геометрическая изомерия от строения самих производных и растворителя, использовавшегося при растворении и кристаллизации [2].

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной ФИЦ КазНЦ РАН для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

1. Chen, L. et al. *ChemMedChem*. **2017**, 12, 1022-1032.
2. Agarkov, A. S. *In Doklady Chemistry*. **2022**, 503(1), 45-50.

ТЕРМОДИНАМИКА СОРБЦИИ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗИМИДАЗОЛА В УСЛОВИЯХ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

А.Ю. Холин, О.В. Мокеева

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева,
Самара, Россия*

Работа посвящена исследованию термодинамики сорбции 15 впервые синтезированных производных бензимидазола, содержащих заместители в положениях 1 и/или 2, 5, 6, потенциальные возможности технологического и биотехнологического применения которых делают весьма актуальными разработку и совершенствование методов исследования этих веществ.

Эксперимент проводили на газовом хроматографе «AgilentTechnologies» 6850 с использованием кварцевой капиллярной колонки длиной 30 м и диаметром 0,32 мм с метилсилоксановой неподвижной фазой, содержащей 5% фенильных групп (HP 5MS) (толщина плёнки фазы 0,25 мкм). Объем вводимой пробы - 1 мкл. На основании полученных данных установлено, что величины энергии сорбции исследованных азотистых гетероциклов на выбранной неполярной неподвижной фазе отрицательны и изменяются симбатно изменению объема, поляризуемости, площади поверхности и липофильности молекул сорбатов. Основной вклад в удерживание вносит бензимидазольный фрагмент, обуславливающий весьма значительные величины сорбционных характеристик. В то же время установлено, что существенные коррективы в удерживание и, следовательно, порядок элюирования исследованных сорбатов вносит стерический фактор. Удлинение углеводородной цепи в алкоксигруппе, находящейся в положении 1 бензимидазольного фрагмента, практически не влияет на величины удерживания, в то время как появление дополнительных метильных радикалов в положениях 5 и 6 существенно увеличивает сорбцию. При этом энергия сорбции 1,2-производных бензимидазола оказывается вполне сопоставимой с энергией 1-замещенных, несмотря на существенные различия в объемах и поляризуемости их молекул. Неаддитивность изменения значений $\Delta G(\text{CH})_2$ с ростом числа метиленовых звеньев в цепи заместителей, вероятно, обусловлена влиянием стерического фактора.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания по гранту № FSSS-2020-0016.

РЕАКЦИЯ ТРИС(4-ФТОРФЕНИЛ)ФОСФИНА С АКРИЛОВОЙ И 3-(2-ТИЕНИЛ)АКРИЛОВОЙ КИСЛОТАМИ

А.Д. Моряшева, А.В. Нафикова, С.Р. Романов, И.В. Галкина, Ю.В. Бахтиярова

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

nastik-2014@mail.ru

Производные трис(4-фторфенил)фосфина используются в качестве органокатализаторов, лигандов в комплексах различных металлов.

Так как уже известны реакции трифенилфосфина с непредельными карбоновыми кислотами и их галогенпроизводными с образованием карбоксилатных фосфатаинов, были проведены реакции трис(4-фтортрифенил)фосфина с акриловой кислотой (схема 1) и 3-(2-тиенил)акриловой кислотой (схема 2).

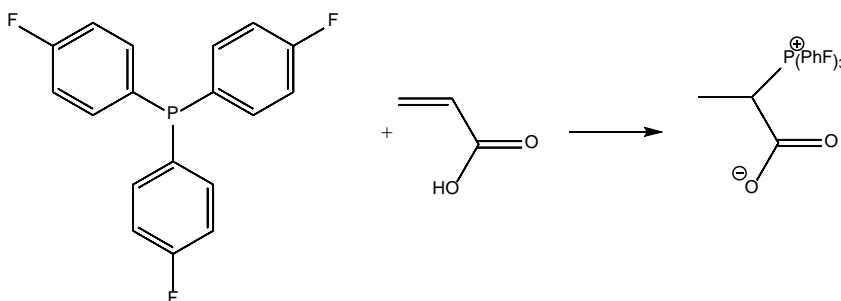


Схема 1.

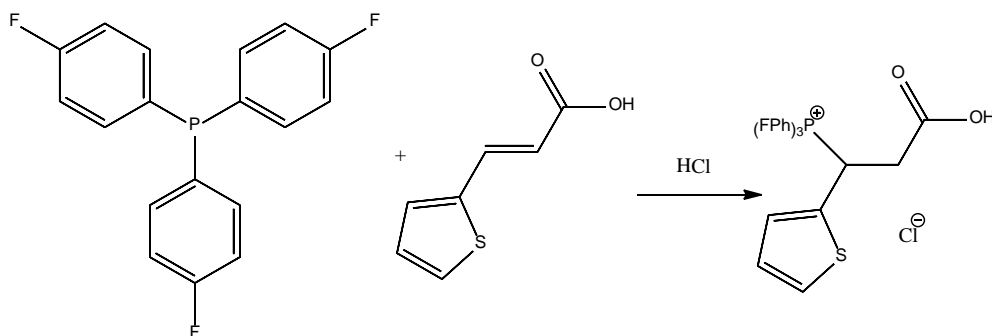


Схема 2.

Синтезированные соединения были охарактеризованы комплексом спектральных методов.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИННОВАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ МОДЕРАЦИИ НА УРОКАХ ХИМИИ

Д.И. Муринова, И.Д. Низамов

Химический институт им. А.М. Бутлерова, К(П)ФУ, Казань, Россия

darya-murinova@mail.ru

В настоящее время в России идет интенсивное развитие новых методик и технологий в обучении, это связано с введением ФГОС, основой которого является применение системно-деятельностного подхода на уроках. Одной из новейших методик является технология модерации, которая направлена на групповую работу обучающихся. Именно поэтому данная тема является актуальной в современном образовании [1]. Главная задача современного образования – воспитать личность, которая будет готова к социальной жизни. Учитывая, что в настоящее время многие учителя химии придерживаются традиционной педагогики, достижение современных целей образования не совсем возможно. Использование технологии модерации в обучении химии позволит на уроках организовать работу обучающихся так, чтобы они осознанно приобретали знания по химии и эффективно могли использовать их для достижения результатов в дальнейшей жизни. При применении данного метода ставятся цель и задачи, которые заключаются в том, чтобы добиться познавательной активности класса. Для реализации цели и задач целесообразно использовать различные активные методы обучения: «автобусная остановка», «биржа информации» и другие [2]. Метод модерации лучше использовать тогда, когда преподаватель организует образовательный процесс таким образом, чтобы участие обучающихся на уроке было осознанным, деятельностным, заинтересованным и мотивированным на дальнейшее обучение. Технология модерации на уроках химии позволяет обучающимся не только получить предметные знания, но и навыки и личностные качества, которые пригодятся в жизни: правильное принятие решений для достижения поставленных целей.

1. Ибениева Л. М. Соответствие технологии модерации требованиями ФГОС основного общего образования // Наукосфера. 2020. № 5. – С. 5-8.
2. Петров А. В. Дискуссия и принятие решений в группе: технология модерации: учебно-методическое пособие / А. В. Петров. – СПб.: Речь, 2005. – С. 79-80.

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ МЕДИ(II) С β -АМИНОТРИКАРБАЛЛИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ

А.О. Мустафина^а, Э.Т. Гайфуллина^а, А.В. Низовцев^б, Р.Р. Заиров^а, А.Б. Зиятдинова^а, Р.Р. Амиров^а

^а Казанский федеральный университет, Казань, Россия

^б ООО "Газпромнефть - Промышленные Инновации", Санкт-Петербург, Россия

annette_zb@mail.ru

Интерес к аминокислотам не ослабевает в науке многие годы, поскольку данные биолиганды позволяют моделировать фрагменты пептидов живых организмов и оценивать, таким образом, действие различных факторов, в том числе на белковую оболочку вирусов. Одним из перспективных направлений исследования в этой области является разработка назальных противовирусных спреев. Так, недавно препарат на основе глюконата меди был предложен в качестве дополнительной защиты против новой коронавирусной инфекции. Действие спрея основано на прочном связывании остатков четырех аминокислот в шипе коронавируса ионами меди(II), что препятствует расщеплению вируса SARS-Cov-2, его дальнейшему распространению и заражению живых организмов.

В данной работе в качестве объекта исследования была выбрана β -аминотрикарбаллиловая кислота (H_3Y), имеющая в составе одну амино- и три карбоксильные группы. В связи со сложностью синтеза данного лиганда сведения о кислотно-основных и комплексообразующих свойствах в настоящее время в литературе не найдены. В работе впервые были получены данные по кислотно-основным и комплексообразующим свойствам H_3Y по отношению к ионам $Cu(II)$. В аналогичных условиях были проведены эксперименты с аспарагиновой, лимонной и нитрилотриуксусной кислотами для оценки роли заместителей в лиганде при комплексообразовании. Исследования проводили методами спектрофотометрии, ЯМР-релаксации и рН-метрического титрования в водном растворе на фоне 150 мМ NaCl, имитирующем физиологическую среду организмов. Величины констант равновесия в растворах получали математической обработкой экспериментальных данных по программе CPESSP.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030») и грантов РФФИ 21-13-00115, 22-13-00010.

МЕТОДИКА ОБУЧЕНИЯ РАЗДЕЛА «КИСЛОТЫ» В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ

К.Р. Мухаметшина, А.Р. Камалеева

Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

mukhametshina_kamilya@mail.ru

Изучение раздела «кислот» в средней школе вызывает некоторые проблемы у учащихся, так как при каждом изучении неорганической химии в школьном курсе тема кислот рассматривается с новой стороны. Перед учителем должны стоять задача: раскрыть не только термин «кислоты» с научной стороны, но и дать учащимся понять, что с развитием мира, по истечению некоторого времени не только термин «кислоты» эволюционировал, но и изучение всего раздела классов неорганической химии, с точки зрения историзма поменялось.

При прохождении темы «кислот», именно с точки зрения неорганической химии, учащиеся должны узнать:

- Что такое кислота с точки зрения состава? (при изучении кислот в 8 классе, учащиеся знакомятся с кислотами как со сложными веществами, которые состоят из атомов водорода и кислотного остатка, какие кислоты называются кислородосодержащими и бескислородными и др.)

- Что такое кислоты с точки зрения электролитической диссоциации? (при изучении электрохимической диссоциации в 9 классе, учащиеся изучают кислоты с точки зрения электролитической диссоциации, на какие ионы распадаются кислоты, почему некоторые кислоты сильные, а другие слабые и т. д.)

- Что такое органические кислоты, и как они связаны с неорганическими кислотам? (При прохождении органической химии, а именно кислородосодержащих органических соединений, в 10 классе, учащиеся изучают различие органических кислот от неорганических, их физические и химические свойства и др.)

- Что такое кислота с точки зрения гипотеза Лавуазье, с точки зрения водородной теории Либиха, с точки зрения теории электролитической диссоциации Аррениуса и точки зрения протолитической теории Бренстеда-Лоури? (то есть при изучении кислот в 11 классе, учащиеся углубляют свои знания в данной области, узнают о том, что кислоты могут быть раскрыты с разной точки зрения и др.)

Именно из-за того, что кислоты с каждым учебным годом рассматривается с разной стороны, у учащихся возникают затруднения при изучении их химических свойств и не только. Задача каждого педагога – направить учащихся в нужное направление, чтобы они смогли узнать все необходимое для них, чтобы они поняли, что кислоты – это не только класс неорганической химии. они должны понять, что кислоты это как многофункциональное понятие, которое раскрывается каждый раз по новому, если рассматривать его под разными углами.

Таким образом, можно сделать некий небольшой вывод, что изучение кислот несет в себе большой смысл в школьном курсе химии. также, нужно учитывать и то, что изучение темы «кислоты» в базовых классах и классах с профилем различается. К примеру, при изучении темы электролитической диссоциации кислот в 11 классах по профильному направлению, то кислоты изучаются как электролиты, которые в водном растворе распадаются на один вид катионов – H^+ (с точки зрения катиона гидроксония – H_3O^+).

В средней школы, учащиеся как правило выбирают профили, которые были бы им более интересны, поэтому нужно понимать, те учащиеся, которые выбирают профильное обучению по химико-биологическому направлению должны быть мотивированы на углубленное изучение химии, а педагог, в свою очередь должен направлять учащихся на изучение более сложного материала. Из чего можно делать вывод, что особое внимание при изучении данной темы нужно обращать на подбор методического и теоретического материала.

АНТИМИКРОБНЫЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ГУАНИДИНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНА

В.А. Назмутдинова^а, Ю.И. Александрова^а, Д.Н. Шурпик^а, П.В. Зеленихин^б, И.И. Стойков^{а,с}

^а Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

^б Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия

^с ФГБНУ Федеральный центр токсикологической,
радиационной и биологической безопасности, Казань, Россия

n-vika-art@mail.ru

Две трети хронических инфекций у людей связаны с бактериальными биопленками, представляющими серьезную угрозу для здоровья человека. Однако большинство современных антибактериальных средств не способны разрушить предварительно сформированные патогенными микроорганизмами биопленки. Таким образом, существует острая необходимость в разработке новых антибактериальных агентов, способных проникать через барьеры биопленки для их эффективного разрушения. Большой потенциал в качестве антибактериальных агентов показали супрамолекулярные системы, сформированные на основе макроциклических структур. В качестве таких веществ нашли применение полифункциональные катионные пиллар[5]арены (производные парациклофанов). В данной работе была разработана стратегия региоселективной функционализации пиллар[5]арена с получением новых водорастворимых гуанидиновых макроциклов с антибактериальными свойствами. Структура полученных макроциклов была подтверждена и охарактеризована комплексом физических методов (¹H, ¹³C ЯМР, ИК спектроскопия, ESI и MALDI масс-спектрометрия).

Методом динамического светорассеяния было показано, что пиллар[5]арен, содержащий девять гуанидиновых фрагментов, в концентрации 10⁻⁵ М в воде образует устойчивые самоассоциаты ($d_{ср}=141$ нм, PDI=0.22). Морфология полученных ассоциатов была изучена методом просвечивающей электронной микроскопии, согласно данным которой поверхность образующейся пленки состоит из ассоциатов дендридной формы.

Оценка ингибирующей активности синтезированных макроциклов на основе пиллар[5]арена, содержащего десять гуанидиновых фрагментов проводилась по отношению к пяти штаммам бактерий (*Salmonella typhimurium* TA 98, *Klebsiella pneumoniae*, *Staphylococcus epidermidis*, *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*). Было показано, что целевой макроцикл ингибирует рост всех представленных бактериальных биопленок (МИК=2-7×10⁻⁵). В случае с макроциклом, содержащим девять гуанидиновых фрагментов, оценка проводилась по отношению к двум штаммам бактерий (*Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*). Была выявлена обратная зависимость – с уменьшением концентрации макроцикла наблюдается рост его ингибирующей способности к подавлению развития бактериальных пленок.

Таким образом, была разработана стратегия региоселективного синтеза новых водорастворимых катионных тиапроизводных пиллар[5]арена, содержащих гуанидиновые фрагменты, что может найти применение в качестве новых антибактериальных агентов по отношению к биоплёнкам патогенных бактерий.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 22-73-10166.

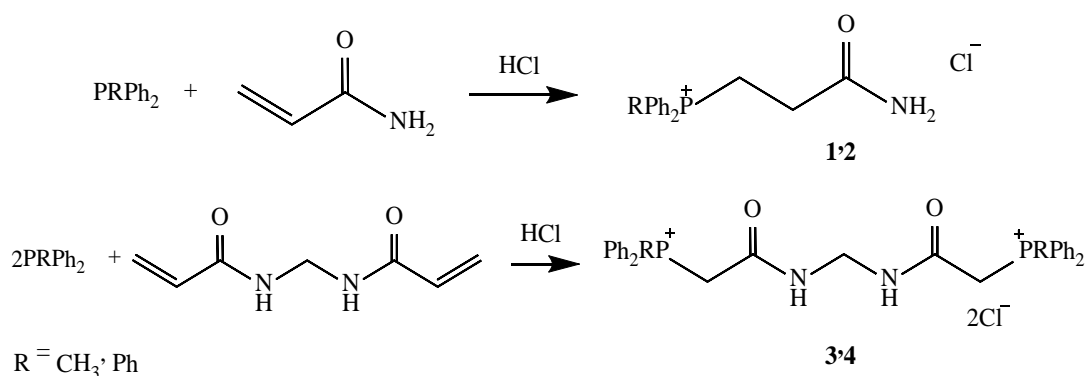
ТРЕТИЧНЫЕ ФОСФИНЫ В РЕАКЦИЯХ С АМИДАМИ АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

А.В. Нафикова, А.И. Хафизова, С.Р. Романов, И.В. Галкина, Ю.В. Бахтиярова

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия**nafikova.2001@bk.ru*

Четвертичные фосфониевые соли вызывают интерес исследователей благодаря их биоцидным свойствам.

Были проведены реакции третичных фосфинов с амидами акриловой кислоты. На первом этапе в качестве амидов использовали акриламид и N, N' –метиленакриламид. Реакции проводили в ацетонитриле с добавлением избытка концентрированной хлороводородной кислоты при нагревании.



В результате были выделены кристаллические продукты. Структуры полученных соединений охарактеризованы методами ЯМР, ИК спектроскопии.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИ(АЗУРА А), СИНТЕЗИРОВАННОГО ИЗ ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИХ СРЕД

Ю.А. Нестерова, А.И. Гойда, А.В. Порфирьева, Г.А. Евтюгин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

junesterova55@gmail.com

Сенсорные и биосенсорные устройства в последнее время находят широкое применение для анализа соединений разных классов – от белковых молекул до низкомолекулярных соединений. Подобные устройства востребованы в медицине, экологии, пищевой промышленности, фармакологии. Для улучшения аналитических и операционных характеристик разрабатываемых сенсорных устройств, поверхность преобразователя сигнала модифицируют проводящими и электроактивными покрытиями, получаемыми путем электрополимеризации.

Одной из причин недостаточной эффективности электрополимеризации красителей фенотиазинового ряда может являться их недостаточная растворимость в воде. В связи с этим была проведена оценка возможности электрополимеризации фенотиазинового красителя Азура А из водно-органических сред, содержащих 10% этанол или изопропанол, а также из водных растворов, насыщенных тетрахлорметаном. Введение органических растворителей улучшало разрешение редокс-пигов на вольтамперных кривых. Присутствие спиртов в среде для электрополимеризации оказывало примерно одинаковое влияние на характер вольтамперограмм. Межмолекулярные взаимодействия (ассоциация, ион-дипольные, водородные связи) усиливаются с уменьшением диэлектрической проницаемости. Как и ожидалось, наиболее заметным приростом анодных токов от цикла к циклу обладали вольтамперограммы, зарегистрированные в присутствии тетрахлорметана, имеющего наименьшую диэлектрическую проницаемость.

Для полученных полимерных покрытий были рассчитаны электрохимические параметры, представленные в таблице:

Органический растворитель	Без растворителя [1]	10% Этанол	10% Изопропанол	Тетрахлорметан (насыщ.)
<i>dE/dpH</i>				
Мономер	-0.073±0.004 (2-7)	-0.052±0.002 (2-7)	-0.051±0.002 (2-7)	-0.053±0.002 (2-6)
Полимер	-0.054±0.006 (2-6)			
<i>lgI/lgV</i>				
Окисление мономера	0.44±0.02	0.48±0.02	0.54±0.02	0.48±0.02
Окисление полимера	0.84±0.03	0.80±0.01	0.86±0.01	0.92±0.01
Восстановление мономера	-	0.69±0.02	0.52±0.03	0.99±0.16
Восстановление полимера	0.81±0.03	0.84±0.01	0.86±0.01	0.80±0.01

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ 20-03-00207

1. Porfireva, A. Electrochemical DNA sensor based on poly(Azure A) obtained from the buffer saturated with chloroform. *Sensors* 2021, 21, 2949.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВОГО БАЛАНСА ПРИ ФОРМОВАНИИ КРУПНОГАБАРИТНОГО КОМПОЗИТНОГО ИЗДЕЛИЯ

Н.Ф. Салихов, В.С. Никитин, О.Л. Хамидуллин

*Казанский национально – исследовательский технический университет им.А.Н.Туполева
(КНИТУ-КАИ), Казань, Россия*

darya.desh01@mail.ru

Области использования крупногабаритных толстостенных изделий из полимерных композиционных материалов постоянно расширяются, однако процесс изготовления таких изделий имеет ряд сложностей, связанных как с перегревом в результате экзотермической реакции отверждения связующего, так и с короблением детали. Экспериментальная оптимизация процесса для таких изделий требует значительных материальных затрат и ей характерна повышенная опасность, из-за чего требуется постоянный мониторинг процесса. Предварительное моделирование изготовления изделия позволяет быстро и достаточно точно оптимизировать параметры и существенно снизить материальные затраты на эксперименты.

Цель этой работы состоит в разработке физической модели отверждения полимерных композиционных материалов (ПКМ). С использованием численных методов построена математическая модель, описывающая протекающие при отверждении процессы. Проведено исследование теплофизических свойств (теплоемкость, кинетика реакции отверждения, тепло- и температуропроводность, плотность, коэффициент линейного расширения) препрега стеклопластика при отверждении методами термического анализа, построены температурные зависимости. С использованием полученной математической модели проведен расчет температурных полей, возникающих в плите стеклопластика при его отверждении в прессе, получены значения перегревов срединного слоя плиты по отношению к поверхностному. Выполнено сравнение значений температур, полученных при моделировании, и при фактическом отверждении образцов. Определены модуль упругости и температуры стеклования стеклопластика и установлено влияние перегрева слоев на механические характеристики стеклопластика.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ АЦЕТАЛЬДЕГИДА С АММИАКОМ В ТВЕРДОЙ ФАЗЕ В КОСМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

А. Николаев^{a,b}, А.А. Рудь^a, В.Н. Аязов^{a,b}, А.М. Мебель^{a,c}

^a Самарский университет, Самара, Россия

^b СФ ФИАН, Самара, Россия

^c Международный университет Флориды, Майами, США

nikolayev_tolya57@inbox.ru

Сложные органические молекулы (СОМ): альдегиды, кетоны, карбоновые кислоты, сложные эфиры, амиды и нитрилы – повсеместно распространены в межзвездной среде. Четкое понимание путей синтеза СОМ имеет фундаментальное значение для астрохимии. Несмотря на важную роль этих соединений в изучении эволюционной стадии молекулярных облаков и областей звездообразования отсутствуют окончательные доказательства механизмов их образования. Химические реакции в твердой фазе, вызванные ионизирующим излучением на поверхности холодных межзвездных пылинок, представляются более результативным способом образования СОМ по сравнению с газофазными реакциями [1].

В рамках подхода SCRF//SMD были исследованы механизмы химического превращения ацетальдегида в этанимин во льдах аммиака. Построены диаграммы поверхности потенциальной энергии реакций, где молекулы аммиака (одна или две) явно участвовали в переносе атомарного водорода, заметно уменьшая значения энергетических барьеров и делая реакцию более вероятной в космических условиях.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках гранта № 075-15-2021-597 «Происхождение и эволюция органических молекул в нашей Галактике».

1. M.J. Abplanalp, R.I. Kaiser, On the formation of complex organic molecules in the interstellar medium: untangling the chemical complexity of carbon monoxide-hydrocarbon containing ice analogues exposed to ionizing radiation via a combined infrared and reflectron time-of-flight analysis. // Physical Chemistry Chemical Physics, 2019, v. 21, p. 16949-16980.

ЗНАЧЕНИЕ ПРОПЕДЕВТИКИ ДЛЯ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ

В.О. Носков, А.Р. Камалеева

Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

potodorish15@mail.ru

Химическая наука является одним из основных направлений естественнонаучного цикла. Первоначальное «погружение» в предмет химии, как правило, начинается именно с такого предмета, как естествознание, если такой предмет предусмотрен школьным курсом.

До недавнего времени изучение курса химии велось по одной программе и учебнику для всех школ, но данная модель изучения химии не реализовало самую главную цель образования – быть доступным и понятным для учащихся. В связи с этим, у многих учащихся возникали проблемы при изучении курса химии на протяжении всей школьной жизни, а попытки улучшить качество материала и учебников, сводились к простому сокращению некоторых материалов. Именно поэтому, пропедевтическая подготовка учащихся по химии несет огромный вклад при изучении всего школьного курса химии.

Как правило, первое знакомство с химией, как с предметом начинается в начальной школе, при изучении предмета «Окружающий мир», где учащиеся изучают экологические проблемы, и последующим изучением предмета естествознания в 5-6 классах. Так как химия – прикладная наука, изучение химии без практической стороны и экспериментов невозможно, поэтому с целью мотивации, при изучении естествознания, педагоги как правило показывают демонстрационные эксперименты. Химические знания, которые даются на данных этапах дают толчок к решению вопроса о целостном представлении мира.

Среди всех этих курсов, можно выделить пропедевтический курс по химии для 7 классов, он имеет особое значение, при изучении всего школьного курса химии, и каждый автор пропедевтических курсов рассматривает пропедевтику именно со своей точки зрения. К примеру, изучение химии в пропедевтических классах можно направить на изучение химических веществ или же за основу взять химические реакции.

Чаще всего в средней школе даются именно такие пропедевтические курсы, которые направлены на изучение первоначальных химических понятий, в которых изучаются основные химические термины, понятия, даются первые представления об атомах и веществе. Еще одним положительным моментом того, что пропедевтика по химии в 7 классах служит основой – это то, что именно в 7 классах начинается изучение физики учащимся легче понять взаимосвязь физики и химии.

Изучение пропедевтики через призму химических понятий имеют структуру и служит основой при изучении химии в старших классах. (Схема 1)



Можно заметить связь понятий с мыслительными операциями, то есть чем раньше начнется изучение основных химических понятий, тем лучше будут учащиеся понимать взаимосвязь всех

данных понятий. Именно поэтому, пропедевтические курсы при изучении школьного курса химии несут огромное значение как для учащихся, так и для педагога.

Исходя из всего вышесказанного, можно сделать некий итог, и сказать, что в связи с изменением школьного курса химии, пропедевтика имеет весомое значение в школьном курсе химии. При помощи пропедевтических курсов, именно в 7 классе, можно облегчить весь школьный материал, который дается для изучения в средней школе.

1. Волова, Н.Ф. Пропедевтический курс для семиклассников / Н.Ф. Волова, Г.М. Чернобельская. – М.: Химия в школе, 1998, № 3, с. - 29.
2. «Оценка качества». Подготовка выпускников основной школы по химии. – М.: Дрофа, 2001.
3. Чернобельская, Г.М. Введение в химию. Мир глазами химика / Г.М. Чернобельская, А.И. Дементьев. - М.: Владос, 2003.
4. Шепелев, М.В. Научно-методические основы организации эффективной работы с одаренными детьми на пропедевтическом этапе изучения химии: монография / М.В. Шепелев. – Пенза: Научно-издательский центр «Социосфера», 2012. – 153 с.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОДЕЛЬНЫХ ТРАНСПОРТНЫХ БЕЛКОВ С ПОЛИАМИДОАМИННЫМИ ДЕНДРИМЕРАМИ НА ОСНОВЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА

Д.Г. Овчинников^а, О.А. Мостовая^а, И.И. Стойков^{а,б}

^а Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^б ФГБНУ Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности, Казань, Россия

danya1075@mail.ru

Термин «макроциклы» охватывает огромный спектр химических структур, поэтому главной целью многих научных групп, работающих в области супрамолекулярной и медицинской химии, является создание библиотек макроциклических соединений, потенциально способных к связыванию с биологически важными соединениями, в частности, с белками. Это актуальная задача, поскольку при разработке лекарств необходимо знать, какие структурные особенности макроциклов усиливают эффективность и специфичность связывания с целевыми субстратами, а также каково их влияние на структуры биомолекул. Целью данной работы является изучение взаимодействия полиамидоаминных производных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, находящихся в различных стереоизомерных формах, с транспортными белками. Спектральными методами (УФ/видимая, флуоресцентная спектроскопия, спектроскопия кругового дихроизма) изучены процессы комплексообразования между дендримерами с макроциклическим ядром и гемоглобином, бычьим сывороточным альбумином и лизоцимом. Методами динамического светорассеяния и электронной микроскопии исследованы ассоциаты биополимеров с функционализированными макроциклами, установлены их размеры. В результате исследования комплексом физических методов было показано, что все дендримеры с макроциклическим ядром способны к связыванию модельных белков с сохранением пространственной структуры последних. Конфигурация макроциклической платформы существенного влияния на характеристики связывания не оказывает. Данный факт объясняется особенностями пространственного строения данного макроцикла, который представляет собой молекулу с чётким разграничением гидрофильной и гидрофобной областей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-73-20067) и за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

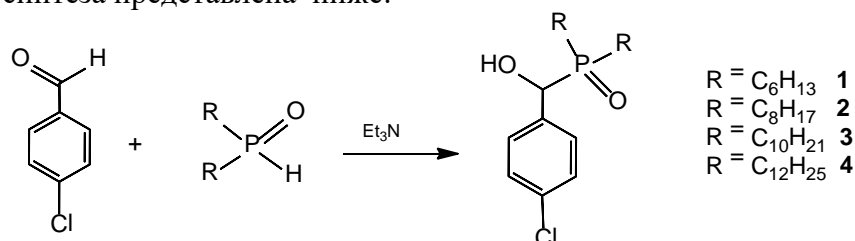
СИНТЕЗ И СТРУКТУРА НОВЫХ α -ГИДРОКСИФИНОКСИДОВ

А.Р. Осогосток, А.Н. Седов, Р.Р. Давлетшин

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

osogostok.sasha@mail.ru

α -Гидроксифиноксиды широко известны как ингибиторы ферментов, гербициды, антибиотики и фунгициды, а также как соединения, обладающие цитотоксическими и антиоксидантными свойствами [1, 2]. Одним из методов получения α -гидроксифосфиноксида является фосфорилирование карбонильных соединений с образованием связи Р-С по реакции Абрамова (альдольная конденсация) [3-5]. С использованием реакции Абрамова нами была получена серия α -гидроксифиноксидов, содержащих липофильные заместители у атома фосфора [2]. Общая схема синтеза представлена ниже:



Синтез проводили в присутствии триэтиламина в качестве катализатора в растворе бензола ввиду его простоты, дешевизны, экологичности и высокоэффективности. Полученные продукты выделены из реакционной смеси и очищены перекристаллизацией из этилацетата. Установлено, что скорость реакции зависит от размера алифатического заместителя у фосфинистой кислоты: чем меньше заместитель, тем быстрее проходит реакция.

Аналогичные синтезы нами были проведены при использовании микроволнового излучения с целью увеличить скорость реакции. Реакции проводили при температуре 120°C в течение 20 минут без растворителя. Установлено, что использование микроволнового излучения позволяет повысить скорость реакции.

Все полученные соединения охарактеризованы физическими методами исследования: ЯМР 1H , ^{31}P , ^{13}C , ИК и рентгеноструктурным анализом.

Полученная серия соединений будет использована в качестве прокуроров для синтеза более сложных производных.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

1. Z. Rádai // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements, 2019, **194**, 4-6, P. 425-437.
2. D. Enders, A. Saint-Dizier, M.-I. Lannou, A. Lenzen // Eur. J. Org. Chem., 2006, P. 29-49.
3. D. Vincze, P. Ábrányi-Balogh, P. Bagi, G. Keglevich // Molecules., 2019, **24**, P. 3859-3871
4. Вацуро, К. В. Именные реакции в органической химии / К. В. Вацуро, Г. Л. Мищенко // М: Химия. - 1976.
5. Ерастов, О. А. Функциональнозамещенные фосфины и их производные / О. А. Ерастов, Г. Н. Никонов // М: Наука. - 1986.

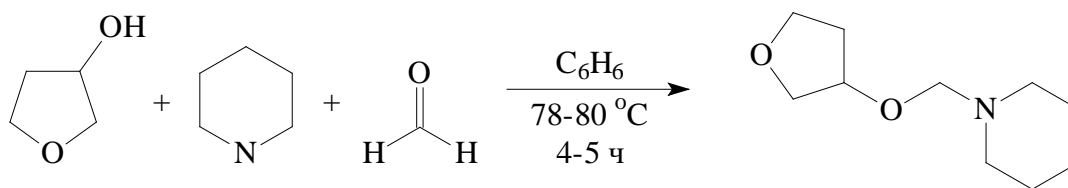
ОСНОВАНИЯ МАННИХА НА ОСНОВЕ ТЕТРАГИДРОФУРАНОЛА-3 И ПИПЕРИДИНА

Ш.М. Охиров, Э.Р. Латыпова, Р.Ф. Талипов

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», Уфа, Россия

okhirov1999@mail.ru

Однореакторной реакцией Манниха тетрагидрофуранола-3 **1** – продукта, синтезированного с использованием на ключевой стадии реакции Принса на основе хлористого аллила [1], с пиперидином в присутствии формальдегида получен [(тетрагидрофуран-3-илоксо)метил]пиперидин **2** с выходом 91 %. Соединение **2**, согласно программе Pass Online, может проявлять противовирусные свойства и может быть использовано при лечении фобических расстройств.



1. Р.Ф. Талипов, А.Г. Мустафин. Синтез практически ценных гидрированных фуранов. Уфа: Гилем, 2009. 160 с.

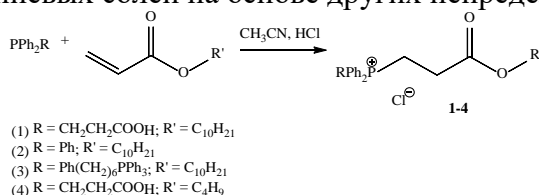
СИНТЕЗ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ И СООТВЕТСТВУЮЩИХ ФОСФАБЕТАИНОВ НА ОСНОВЕ НЕПРЕДЕЛЬНЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

А.В. Паденко, К.О. Шibaева, С.Р. Романов, Ю.В. Бахтиярова

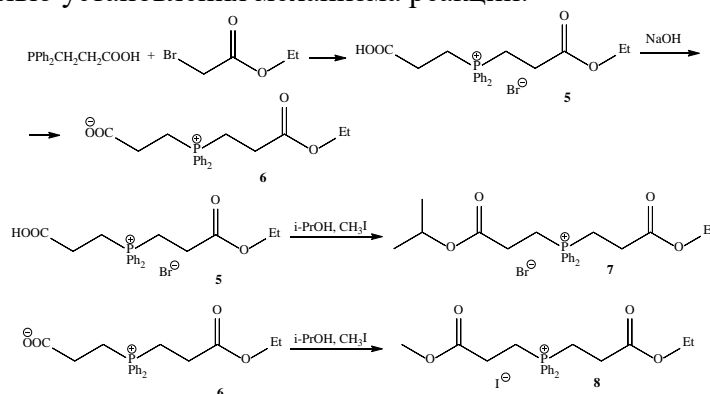
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

alyonushka.2017@mail.ru

Ранее в нашей группе были проведены реакции третичных фосфинов с замещенными коричными кислотами [1]. В продолжение исследований интересным представляется изучение возможности синтеза фосфониевых солей на основе других непредельных карбоновых кислот.



При помощи альтернативной методики синтеза на основе ω-галогенкарбоновых кислот [2] была получена соль и соответствующий бетаин, которые на последующей стадии были проалкилированы с целью установления механизма реакции.



Работа выполнена за счёт средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (номер проекта 0671-2020-0063).

1. S. Romanov, A. Aksunova, Y. Bakhtiyarova, M. Shulaeva, O. Pozdeev, S. Egorova, I. Galkina, V. Galkin. J. Organomet. Chem., 2020, **910**, article 121130.
2. S.R. Romanov, A.F. Aksunova, D.R. Islamov, O.N. Kataeva, Y.V. Bakhtiyarova, O.I. Gnezdilov, I.V. Galkina, I.V. Galkin, A.B. Dobrynin, D.B. Krivolapov Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem., 2016, **191 (11-12)**, 1637-1639.

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ АМФИФИЛЫ НА ОСНОВЕ МОНО-, -СЕСКВИ И ДИТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ: СИНТЕЗ И ИНКАПСУЛИРОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ПРЕПАРАТОВ

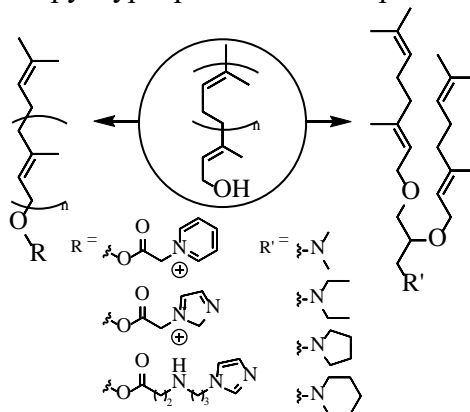
Ю.В. Панина^a, А.А. Ахмедов^a, Д.Н. Шурпик^a, И.И. Стойков^{a,b}

^a КФУ, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

^b ФГБНУ Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности, Казань, Россия

panintim@rambler.ru

Обширный и разнообразный класс природных соединений – терпеноиды, в настоящее время вызывают большой интерес исследователей. Благодаря уникальным характеристикам терпеноиды находят широкое применение в качестве компонентов терапевтических препаратов. Терпеноиды могут выступать как универсальные строительные блоки для синтеза кандидатов в лекарственные средства. В то же время макроциклы, содержащие молекулярные полости, могут выступать в качестве платформ для создания систем адресной доставки. В связи с этим на современном этапе развития науки актуальным является ковалентное и нековалентное объединение макроциклических структур с различными терпеноидными фрагментами.



В представленной работе был синтезирован ряд терпеноидов и получены их комплексы включения по принципу «гость-хозяин» с пиллар[5]ареном. Была исследована зависимость устойчивости образующихся ассоциатов от pH среды, что позволяет использовать pH-контролируемое высвобождение инкапсулированного препарата. Характеристики супрамолекулярной самосборки, константы ассоциации и стехиометрия комплексов пиллар[5]арен / меротерпеноид были установлены методами УФ-спектроскопии и ДСР. Включение противоопухолевого препарата флоксуридина в структуру супрамолекулярного ассоциата подтверждено с помощью спектроскопии ЯМР ¹⁹F и 2D DOSY.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-73-00187) и за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ВОДОРАСТВОРИМЫХ КАТИОННЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ АММОНИЕВЫЕ ФРАГМЕНТЫ

А.В. Пергат, Ю.И. Александрова, Д.Н. Шурпик, И.И. Стойков

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

pergatarina@yandex.ru

Возникновение резистентности к антибактериальным препаратам опередило разработку новых антибиотиков, а высокая распространённость инфекционных заболеваний вызывает крайнюю необходимость новых стратегий борьбы с патогенными микроорганизмами и вирусами для поддержания общественного здоровья. Макроциклические структуры, благодаря уникальным структурным, синтетическим и комплексообразующим характеристикам, широко исследуются для изготовления универсальных функциональных материалов. В частности, катионные пилларарены проявили себя как полезные платформы для формирования архитектур с антибактериальными свойствами. Эти макроциклы, могут открыть альтернативный способ воздействия традиционного лекарства на биопленки патогенных микроорганизмов, способствуя развитию современной медицины и преодолению резистентности.

В нашем исследовании была разработана стратегия направленного синтеза новых водорастворимых производных пиллар[5]арена **1-7**, содержащих аммониевые и стрептоцидные фрагменты. Структура полученных макроциклов **1-7** была подтверждена комплексом физических и физико-химических методов (спектроскопией ЯМР ^1H , ^{13}C , ИК, MALDI и ESI масс-спектрометрией). Далее была изучена ингибирующая активность пиллар[5]аренов **1-7** в подавлении развития патогенных биоплёнок при помощи колориметрического MIC-теста по отношению к ряду биопленок патогенных микроорганизмов. В ходе которой было показано, что пиллар[5]арен **7**, содержащий стрептоцидные фрагменты, обладает антимикробными свойствами, в то время как другие производные не снижают жизнеспособность *Salmonella enterica* во всем диапазоне исследуемых концентраций (10^{-3} - 10^{-7}M).

Таким образом, были синтезированы новые водорастворимые катионные производные пиллар[5]арена, содержащие аммониевые и стрептоцидные фрагменты, изучена и продемонстрирована их антибактериальная активность. Данные макроциклы могут найти применение в качестве компонентов для формирования супрамолекулярных контейнеров, обладающих потенциальными антимикробными свойствами, что расширит спектр возможностей антибактериальных систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ №22-73-10166

ПРОЕКТНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ НА УРОКАХ ХИМИИ

А.В. Петрова, Р.Н. Сагитова

Химический институт им. А.М. Бутлерова, К(П)ФУ, Казань, Россия

nastyanew123@gmail.com

Современному обществу требуется человек, способный выполнять многозадачные функции, своевременно адаптироваться в любой обстановке. Именно поэтому учителя всего мира активно применяют метод проектов. Именно метод проектов включает в себе комплексный характер, позволяя развить способности ребенка. Действительно, в данном методе практикуется обучение в сотрудничестве, исследовательская деятельность, дискуссии, мозговые атаки, ролевые игры, научный метод, а также поисковая работа [1].

Главная задача моего исследования – изучить модернизации многоцелевой и многофункциональной направленности проектной деятельности и разработать план удачного внедрения их в уроки химии. Принимая во внимание то, что химия это одна из самых сложных наук, которая формирует мировоззрение, упорядочивает целостную картину мира и увеличивает кругозор учащихся. Многие дети недооценивают химию, считают ее чересчур сложной и не такой необходимой. Зачастую это происходит из-за снижения времени на изучение предмета при сохранении объёма его содержания.

Проанализировав все положительные и отрицательные стороны школьной проектной деятельности, определила, что отсутствие общепринятых критериев оценки является тем недостатком, который я могу решить [2]. Это сподвигло меня на структурирование таблицы с общими аспектами, которые помогут любому педагогу, более точно и со всех сторон оценить проектную работу учащихся по химии и не совершить крупных ошибок. Изучив результаты опроса школьников, я смогла разработать пошаговую инструкцию по созданию проектной работы, в которой чётко расписаны задачи учеников и учителя. На основании данного исследования в 2022-2023 учебном году я планирую провести проектную работу с учениками 8-9-ых классов по химии.

1. Павлова М.Б., Питт Дж., Гуревич М.И., Сасова И.А. Метод проектов в технологическом образовании школьников: Пособие для учителя / Под ред. И. А. Сасовой. – М, 2003.
2. Каргополов, И. С. Проектная деятельность в школе / И. С. Каргополов. – Текст: непосредственный // Молодой ученый. – 2019. – № 46 (284). – С. 277-279.

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХЛОРАМФЕНИКОЛА НА ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ НИКЕЛЬ-ЗОЛОТО И КОМПОЗИТОМ С ОКСИДОМ ГРАФЕНА

А.А. Поздняк, А.В. Гедмина, И.А. Челнокова, Д.А. Мурдасова, Л.Г. Шайдарова

*Казанский федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

anya_pozdnyak@mail.ru

Хлорамфеникол является антибиотиком широкого спектра действия, используется для лечения детского менингита и брюшного тифа. Кроме того, хлорамфеникол нашел применение и в ветеринарной практике для профилактики и лечения многих бактериальных инфекций. Контроль за применением и продажей этого антибиотика, являющегося активным веществом лекарственного средства - левомецитина необходим, поскольку вызывает побочные токсические эффекты: апластическую анемию, агранулоцитоз и синдром серого ребенка.

Изучено электроокисление хлорамфеникола на электродах с биметаллической системой никель-золото (Ni-Au) и на композите на основе восстановленного оксида графена и бинарной системы (Ni-Au-ГO_{red}), иммобилизованных на поверхность электрода из стеклоуглерода (СУ). Большие значения каталитических эффектов при окислении хлорамфеникола, наблюдаются на композитном электроде Ni-Au-ГO_{red}-СУ. Установлено, что величина каталитического эффекта зависит от условий электрохимического осаждения композита: потенциала, времени потенциостатического осаждения и продолжительности циклирования Ni-Au-ГO_{red}-СУ в сильно-щелочных средах с целью генерации каталитически активных оксоформ биметалла. Выбор условий иммобилизации восстановленным оксидом графена проводился по электрохимическим характеристикам окисления и восстановления ферроцианид-иона.

Разработан способ высокочувствительного вольтамперометрического определения хлорамфеникола на композитном электроде Ni-Au-ГO_{red}-СУ. Нижняя граница определяемых содержаний хлорамфеникола составляет 5×10^{-7} М. Правильность предлагаемого способа оценена методом «введено-найдено» в модельном растворе и на фоне образцов молока. Вольтамперометрический способ детектирования был апробирован при анализе лекарственных средств, содержащих хлорамфеникол.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности.

ПОЛИ(АМИДОАМИННЫЕ) ДЕНДРИМЕРЫ ПЕРВОЙ И ВТОРОЙ ГЕНЕРАЦИИ НА ПЛАТФОРМЕ *n*-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА: СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ СПОСОБНОСТИ К АССОЦИИИ С РЯДОМ КАТЕХОЛАМИНОВ

Д.А. Пысин^а, И.Э. Шибаиев^а, О.А. Мостовая^а, П.Л. Падня^а, И.И. Стойков^{а,б}

^а КФУ, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

^б ФГБНУ Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности, Казань, Россия

pysin_dima@mail.ru

Синтез поли(амидоаминных) ПАМAM дендримеров на платформе тиакаликс[4]арена соединений является перспективным подходом для нивелирования недостатков классических ПАМAM дендримеров, таких как высокая токсичность *in vivo* и *in vitro*. Благодаря такой модификации дендримеров появляется возможность использования преимуществ данной макроциклической платформы, несомненную важность среди которых имеет возможность фиксации платформы в различных конформациях, что способствует подстраиванию связывающих групп к различным субстратам. ПАМAM дендримеры низших генераций с ядром тиакаликс[4]арена по размерам будут сопоставимы с аналогичными дендримерами с этилендиаминовым ядром более высоких генераций, что позволит отказаться от использования токсичных высших генераций классических ПАМAM дендримеров и эффективно связывать биополимеры и другие молекулы-гости, используя меньшее количество стадий синтеза.

Катехоламины (дофамин, *L*-адреналин и *L*-норадреналин) участвуют во множестве физиологических процессов, а также являются маркерами ряда заболеваний центральной нервной системы, также они могут использоваться в качестве лекарственных средств. Поэтому создание молекул, способных распознавать и/или связывать с целью доставки катехоламины является весьма актуальной задачей.

В данной работе представлен удобный метод синтеза поли(амидоаминных) дендримеров первой и второй генерации на платформе тиакаликс[4]арена. С высокими выходами получены новые дендримеры, содержащие макроциклическое ядро в трёх конфигурациях (*конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат*). Комплексом спектральных методов было установлено, что полученные дендримеры первой и второй генерации на платформе *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена способны эффективно связывать исследованный ряд катехоламинов (дофамин, *L*-адреналин и *L*-норадреналин).

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ №21-73-20067

ВЛИЯНИЕ ДЛИНЫ АЛКИЛЬНОГО РАДИКАЛА КАТИОНА ИМИДАЗОЛИЕВОЙ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ НА РАЗДЕЛЕНИЕ СМЕСИ ФЛАВОНОИДОВ МЕТОДОМ ОФ ВЭЖХ

В.М. Разницына^а, Р.В. Шафигулин^а, В.А. Куркин^б, А.В. Буланова^а

^а Самарский университет, Самара, Россия

^б ФГБОУ ВО СамГМУ Минздрава России, Самара, Россия

v_raznitsyna@mail.ru

Флавоноиды, содержащиеся в растениях, представляют собой фенольные вещества, обладающие антиоксидантными, желчегонными, нейротропными и другими важнейшими свойствами [1]. Один из основных методов определения этих веществ в лекарственном растительном сырье – обращенно-фазовая ВЭЖХ.

В работе изучено влияние длины алкильного заместителя в катионе имидазолиевой ИЖ (1-алкил-3-метилимидазолий бромида (алкил – бутил ($[C_4MIM][Br]$), гексил ($[C_6MIM][Br]$), децил ($[C_{10}MIM][Br]$)) на разделение смеси флавоноидов (1 – (+)-катехин гидрата, 2 – рутина, 3 – гесперидина, 4 – кверцетина). Анализ проводили на колонке Luna C18(2) из водно-ацетонитрильных растворов (вода/ацетонитрил – 80/20 об.%). Объем пробы – 20 мкл, скорость потока элюента – 500 мкл/мин.

Установлено, что природа имидазолиевой ИЖ не влияет на порядок выхода исследуемых флавоноидов. С увеличением длины алкильного радикала времена удерживания аналитов увеличиваются (исключение гесперидин). Наименьшее время анализа наблюдается в системе с добавлением в подвижную фазу $[C_4MIM][Br]$ (рис. 1).

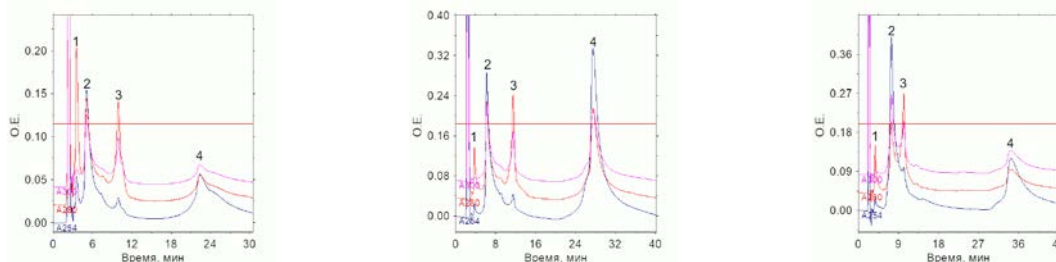


Рисунок 1 – Хроматограмма разделения смеси флавоноидов при 35°C и добавлении $[C_4MIM][Br]$ (а), $[C_6MIM][Br]$ (б) и $[C_{10}MIM][Br]$ (в) в подвижную фазу.

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Министерства образования и науки РФ №FSSS-2020-0016.

1. Куркин В. А., Куркина А. В., Авдеева Е. В. Флавоноиды как биологически активные соединения лекарственных растений //Фундаментальные исследования. – 2013. – №. 11-9. – С. 1897-1901.

СИНТЕЗ И САМООРГАНИЗАЦИЯ ПОИАНИЛИНА, ДОПИРОВАННОГО ПРОИЗВОДНЫМИ ФЕНОТИАЗИНА

М.Р. Раянов, И.И. Стойков

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

raianovm@gmail.com

В последние десятилетия полианилин представляет большой практический интерес как перспективный электропроводящий полимер, обладающий высокой окислительно-восстановительной активностью, парамагнетизмом и нелинейными оптическими свойствами. Простота синтеза, низкая стоимость, термическая стабильность и устойчивость к агрессивным химическим средам позволили ему найти широкий спектр применения в современных технологиях. Тем не менее, практическое использование полианилина осложнено его плохими механическими свойствами: полимер не плавится, не растворяется и не имеет адгезии. Одним из путей решения данной проблемы является получение стабильных дисперсий полианилина.

Нами предложен метод стабилизации водных дисперсий полианилина с использованием хлорида 3,7-бис((4-(сульфо)фенил)амино)фенотиазин-5-ия и хлорида 3,7-бис((3-(сульфо)фенил)амино)фенотиазин-5-ия, выступающих также в качестве допирующего агента полианилина. Дисперсии были получены двумя путями: ультразвуковой обработкой смеси полианилина и водного раствора производных фенотиазина и *in-situ* полимеризацией анилина в присутствии производных фенотиазина.

Стабильность дисперсий была подтверждена с помощью метода динамического рассеяния света. Методом УФ-спектроскопии было выявлено, что кислотно-основные взаимодействия с производными фенотиазина характерны только для полианилина, полученного методом *in-situ* полимеризации. Также показано, что полианилин и производные фенотиазина могут взаимодействовать посредством π -стекинга. Структура полученных соединений подтверждена методами ИК- и ЯМР-спектроскопии.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ СЕНСОРНЫХ СВОЙСТВ ХЕМИКУРКУМИНОИДА ПУТЕМ ЕГО ВКЛЮЧЕНИЯ В ФОСФОЛИПИДНЫЕ И ПОЛИДИАЦЕТИЛЕНОВЫЕ ВЕЗИКУЛЫ.

О.О. Ретюнская^a, Б.С. Ахмадеев^{a,b}, С.Н. Подъячев^b, С.Н. Судакова^b, А.Р. Мустафина^b

^a Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

oretyun@gmail.com

В работе представлен синтез нового представителя хемикуркуминоидов ((E)-5-(4-ponyloxyphenyl)-1-phenylpent-4-ene-1,3-dione далее HCur) с его последующим использованием для создания сенсорной платформы. Для перевода в водорастворимое состояние были использованы супрамолекулярные агрегаты на основе фосфатидилхолина (PC), фосфатидилсерина (PS) и 10,12-пентакозодииновой кислоты (PCDA). Показано, что фосфолипидные агрегаты на основе PS и PC могут нести в себе больше молекул HCur, однако данные системы не обладают сенсорными свойствами на внешние изменения.

Наиболее оптимальной платформой-носителем являются агрегаты на основе диациетиленовых везикул. Полимеризация системы HCur-PDA приводит к образованию агрегатов с колориметрическими и люминесцентными свойствами. Показано, что агрегаты HCur-PDA проявляют отклик на изменение pH в пределах 7,5–9,5, ионы тяжелых металлов и полилизин, при этом концентрационно-зависимый флуоресцентный отклик более чувствителен, чем колориметрический. Таким образом, флуоресцентный отклик HCurOR-PDA позволяет различать ионы Cd²⁺ и Pb²⁺ в диапазоне концентраций 0–0,01 мМ, а колориметрический отклик позволяет селективно определять Pb²⁺ по сравнению с ионами Cd²⁺ при их концентрациях выше 0,03 мМ.

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ СЕЛЕКТИВНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЧЕВОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ГЕКСАЦИАНОКОБАЛЬТАТОМ РУТЕНИЯ

И.Е. Рогожин, А.В. Гедмина, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова, Г.К. Будников

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

Rogozhin.09@mail.ru

Мочевая кислота (МК) – это конечный продукт пуринового обмена, являющийся основной составляющей клеточных запасов энергии, таких как АТФ, а также компонентом ДНК и РНК. Большинство млекопитающих выделяют мочевую кислоту и аллантаин как основные продукты катаболизма пуринов. У людей мочевая кислота является конечным продуктом катаболизма пуринов и образуется в довольно высоких концентрациях из-за отсутствия фермента уриказы, которая у других млекопитающих окисляет мочевую кислоту до аллантаина (более растворимого соединения) с дальнейшим его выведением.

Изучено электроокисление мочевой кислоты на электроде из стеклоуглерода (СУ), модифицированным гексацианокобальтатом рутения (Ш) (ГЦКР) (ГЦКР-СУ) с целью разработки селективного и высокочувствительного способа вольтамперометрического определения.

Осаждение ГЦКР-пленки проводили в потенциодинамическом режиме, с последующей ее стабилизацией (в потенциодинамическом режиме) в фосфатном буферном растворе pH 6.86.

Гексацианокобальтат рутения (Ш) проявляет каталитическую активность при электроокислении мочевой кислоты на ГЦКР-СУ при $E=0.4\text{В}$. Была изучена зависимость каталитического эффекта от условий осаждения модификатора и количества циклов стабилизации в фосфатном буферном растворе. Установлена кинетическая природа тока окисления мочевой кислоты на ГЦКР-СУ.

Разработан способ селективного вольтамперометрического детектирования мочевой кислоты на электроде ГЦКР-СУ на фоне фосфатного буферного раствора с pH 6.86. Установлена возможность определения мочевой кислоты в присутствии аскорбиновой кислоты. Нижняя граница определяемых содержаний для мочевой кислоты составляет 5×10^{-8} М.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

ВЛИЯНИЕ СПОСОБА ВВЕДЕНИЯ ВОССТАНОВИТЕЛЯ НА МОРФОЛОГИЮ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА

А.А. Россова, В.Г. Евтюгин, А.В. Герасимов, Е.В. Халдеева, М.П. Кутырева

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

anastasia.rossova@yandex.ru

Природа веществ, составляющих основу нанофазы и соединений-стабилизаторов, определяют параметры морфологии и функциональные свойства композитных наноматериалов. Однако не меньшее значение для управления характеристиками наносистем имеет выбор синтетического подхода и детализация синтетических процедур. Методом химического восстановления в растворе синтезированы два образца наночастиц кобальта, стабилизированных сверхразветвленным полиэфирополиолом третьей *псевдо*-генерации **PE-OH_{G3}** при мольном соотношении $n_{\text{Co}}:n_{\text{OH}} = 32:1$, $T=50^{\circ}\text{C}$, в качестве восстановителя использовался NaBH_4 . Введение восстановителя в реакционную смесь проводилось в режиме дозирования по 5 мл (**CoNP_{dose}**) и в режиме постоянного прикапывания (**CoNP_{drop}**). По данным УФ-Вид спектроскопии и РФА анализа оба образца представляют собой полимер-композитные наночастицы кобальта со структурой ядро (Co^0) - оболочка (Co_3O_4). Дисперсия наночастиц характеризуется двумя максимумами ППР при 273 нм и 375 нм, что подтверждает наличие металлической Co^0 и оксидной Co_3O_4 фазы. Анализ ИК спектров порошков композитных наночастиц **CoNP** указывает на участие в стабилизации металлической нанофазы гидроксильных и карбонильных (в составе сложноэфирных) групп полимера. Методом анализа траекторий наночастиц (NTA) установлено, что полимер-композитные наночастицы кобальта агрегируют в водном растворе. Образец **CoNP_{drop}** в водном растворе формирует моодисперсные агрегаты с гидродинамическим диаметром $D_h^{\text{cp}}=134\pm 9$ нм и концентрацией $(6.6\pm 1.5)\times 10^8$ частиц/мл. Образец **CoNP_{dose}** характеризуется бимодальным распределением агрегатов в водном растворе, большими величинами их гидродинамического диаметра $D_h^{\text{cp}} = 188\pm 9$ нм и концентрации $(3.71\pm 0.02)\times 10^9$ частиц/мл. Фракционный анализ данных NTA показал наличие в водной дисперсии образца **CoNP_{drop}** агрегатов с гидродинамическим диаметром 135 и 185 нм. По данным СЭМ (рис) показано, что оба образца представлены частицами сферической формы с диаметром 100 нм и 136 нм для **CoNP_{drop}** и **CoNP_{dose}** соответственно.

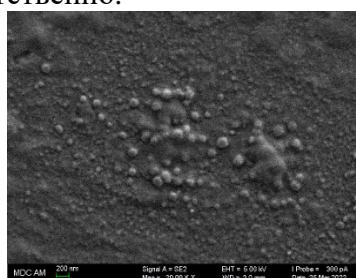


Рисунок 1 – СЭМ-изображение **CoNP_{drop}**.

Синтезированные композитные наночастицы кобальта гемолитически неактивны и являются модуляторами ферментативной активности аспарагиновой протеиназы *химозин Aspergillus niger*. Наночастицы **CoNP_{drop}** в зависимости от концентрации обладают свойствами и отрицательного ($C_{\text{CoNP}_{\text{drop}}}= 0.0001-0.3$ мг/мл, ингибирование 36%), и положительного ($C_{\text{CoNP}_{\text{drop}}}= 0.5-2.0$ мг/мл, активация 55%) модулятора, а **CoNP_{dose}** проявляют свойства только положительно модулятора, $AC_{50}=0.5$ мг/мл. Установлено, что оба типа синтезированных наночастиц дополнительно проявляют антимикотические свойства. По данным микробиологического исследования образец **CoNP_{drop}** обладают более выраженным фунгицидным действием по отношению к дрожжевым грибам *Candida albicans* и к плесневым грибам *Aspergillus fumigatus*, чем наночастицы **CoNP_{dose}**.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОБНАРУЖЕНИЯ ТОКСИЧНОГО АКРОЛЕИНА

Е.Ш. Сайгитбаталова^a, А.Р. Прадипта^b, А.Р. Курбангалиева^a, К. Танака^{b,c}

^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^b Токийский технологический институт, Токио, Япония

^c Кластер новаторских исследований RIKEN, Вако, Япония

ESSajgitbatalova@kpfu.ru

Высокотоксичный акролеин образуется при горении жиров, масел, угля, древесины и пластика. Акролеин может выделяться клетками в условиях окислительного стресса, в ходе ферментативного окисления треонина или полиаминов, а также при окислении полиненасыщенных липидов активными формами кислорода, в связи с чем акролеин является биомаркером ряда болезней, связанных с окислительным стрессом, включая онкологические заболевания.

Предложен новый метод обнаружения и визуализации акролеина, выделяемого клетками в условиях окислительного стресса или попадающего в живые клетки при воздействии окружающей среды, например из табачного дыма. Метод основан на быстрой реакции фенилазида с акролеином, протекающей при комнатной температуре как в органических, так и водных средах с образованием 4-формил-1,2,3-триазаолина [1]. Для исследований в области визуализации живых клеток нами синтезирован флуоресцентный фенилазид, содержащий фрагмент тетраметилродамина (TAMRA). Методом флуоресцентной микроскопии и при использовании TAMRA-меченого фенилазида изучены различные клеточные модели, подверженные окислительному стрессу. Показано, что с помощью флуоресцентного азида можно визуализировать выделяющийся раковыми клетками акролеин и, следовательно, отличить раковые клетки от здоровых. Показана возможность использования данного прямого, удобного и эффективного метода для определения хирургических краев в режиме реального времени, непосредственно во время проведения операций по удалению опухолевых тканей молочной железы [2]. Метод позволяет сократить время операции, проводить четкую морфологическую диагностику рака, избежать рецидива рака молочной железы. Поскольку акролеин вырабатывается различными опухолевыми клетками, то метод можно использовать для сверхбыстрой оценки хирургических краев и при других разновидностях рака.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет–2030»).

1. A. R. Pradipta et al. *ACS Sens.*, 2016, **1**, 5, 623–632.
2. T. Tanei et al. *Adv. Sci.*, 2019, **6**, 2, Art. № 1801479.

ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОФОРИЕНТАЦИОННОЙ РАБОТЫ НА УРОКАХ ХИМИИ

А.М. Салихова, Г.Ф. Мельникова

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

as.salikhova@mail.ru

Актуальность исследования: выбор профессии и самореализация представляют важный аспект личностного развития, но молодые люди задумываются о выборе профессии перед окончанием школы, когда оказываются в стрессовой ситуации, связанной с необходимостью выбора из большого числа профессий. В таких условиях выбор осуществляется спонтанно или под влиянием внешних стимулов, что приводит к трудностям самореализации [1]. Разработка профориентационной работы современного образования является важной составляющей работы педагога. С целью изучения эффективности внедрения современных технологий (методов теста Мотивов выбора профессии Р. В. Овчарова и метода теста-опросника Дубовицкой Т. Т.) профориентации на уроках химии, нами было организовано исследование в параллели 9 классов в МБОУ «Лицей №116 им. Героя Советского Союза А.С. Умеркина» г. Казань. Учащиеся 9-А класса составили экспериментальную группу, в которой внедрялись рекомендации по оптимизации профориентационной работы на уроках химии. Учащиеся 9-Б класса составили контрольную группу, в которой работа проводилась традиционными методами. Нами были выбраны следующие методы исследования: тест Мотивов выбора профессии Р.В. Овчарова, тест-опросник уровня профессиональной направленности Дубовицкая Т.Т. Результаты: в ходе исследования нами было установлено, что преобладающим уровнем профессиональной мотивации является средний (66 и 70% школьников); при этом 17% школьников экспериментальной и 15% учащихся контрольной групп имеют высокий уровень профессиональной направленности, такой же процент демонстрирует низкую мотивацию к выбору профессии. Данные результаты говорят о том, что разработанные нами технологии действительно эффективны и позволяют выявить у учащихся действительный уровень профессиональной мотивации и направленности.

1. Андерсонс, Г. В. Проблема профессионального самоопределения учащихся старших классов профильной школы // Проблема современного образования в школе и вузе: Сборник материалов международной конференции. Ульяновск: УлГПУ. 2004. 129 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ МОДЕЛЬНЫХ НЕФТЯНЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

А.П. Самороднова, Д.А. Емельянов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

samanasta@yandex.ru

Нефть является комплексной системой, свойства которой могут зависеть от разнообразных условий. Одним из эффективных методов добычи тяжелых нефтей является метод внутрипластового горения (ВПГ). В тяжелых или битумных нефтях наблюдается высокое содержание поликонденсированных структур, которые оказывают существенное влияние на её физико-химические свойства. Высокое содержание полиароматических структур затрудняет прогнозирование процесса окисления и формирования фронта горения в пласте и дестабилизирует его, приводя к возможным, резким и неконтролируемым выбросам энергии. Эффективность управления процессами ВПГ напрямую связана с закономерностями их протекания. Поэтому, так значимо изучение отдельных компонентов нефти, их вклада в общие свойства нефти, как целостной системы, а также эффектов аддитивности, связанных с совместным присутствием компонентов и их влиянием друг на друга. Целью данной работы является изучение процесса окисления и взаимного влияния друг на друга линейных ($C_{36}H_{74}$), ароматических ($C_{12}H_{10}$) и полиароматических ($C_{16}H_{10}$) углеводородов с применением методов термического анализа. В ходе работы с помощью термогравиметра и дифференциально сканирующего калориметра высокого давления (ДСК ВД) проанализированы температурный диапазон, интервал реакции, тепловой эффект, температура начала процесса, температура пика, а также анализ эффективной энергии активации данных процессов. По данным ДСК ВД чистый гексатриаконтан окисляется в основном в зоне низкотемпературного окисления. Добавление бифенила сильно изменяет интенсивность тепловыделения, пирен почти не влияет на интенсивность тепловыделения, но сильно изменяет температурные характеристики. Характер кривой смеси бифенила и пирена указывает на слабое связывание. Для систем гексатриаконтана и пирена обнаружено значительное смещение процесса окисления в сторону высоких температур и изменение вида зоны высокотемпературного окисления. В случае смеси гексатриаконтана с пиреном (в соотношении 1:4 по массе) наблюдается интенсивное тепловыделение, что может указывать на протекание дополнительного процесса. В результате анализа кинетических параметров ДСК ВД данных не удалось обнаружить четких закономерностей при изменении соотношения компонентов в разных пропорциях.

СИНТЕЗ БИС(2,2,3,3-ПЕНТАФТОРПРОПИЛОВОГО) ЭФИРА ПЕНТАФТОРБЕНЗИЛИДЕНМАЛОНОВОЙ КИСЛОТЫ И ЕГО РЕАКЦИЯ С 2,3-ФЕНИЛ- БЕНЗО[*D*]-1,3,2-ОКСАЗАФОСФОРИН-4-ОНОМ

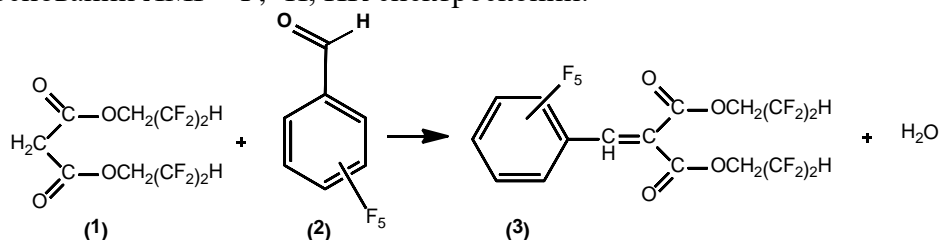
Л.И. Сафарова, Г.А. Ивкова, В.Ф. Миронов

*Казанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань,
Россия*

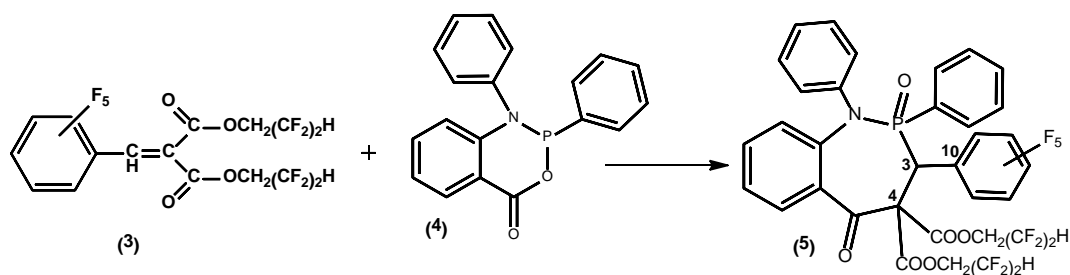
safarlenova102@mail.ru.

Цель представленной работы – синтез циклических фосфорилированных производных гидроксиароматических кислот (салициловой, фенилантраниловой кислот) и получение на их основе гетероциклов с эфирами арилиденмалоновых кислот.

Для усиления поляризации кратной связи и облегчения реакции нами впервые был получен эфир бензилиденмалоновой кислоты, содержащий акцепторные фторированные группы. Методика синтеза нового соединения подробно нами описана, строение соединения (3) установлено на основании ЯМР ^{19}F , ^1H , ИК спектроскопии.



Была проведена реакция эфира бензилиденмалоновой кислоты с фенилантранилфосфонитом (4). Ход реакции контролируется методом ЯМР ^{31}P спектроскопии. Процесс протекает достаточно медленно, но стерео- и региоселективно.



Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № 0671-2020-0063.

САМОРЕЗИСТИВНАЯ СВАРКА УГЛЕПЛАСТИКОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА

Н.А. Андросов, А.Р. Сафин, Л.М. Амирова

*Казанский национально – исследовательский технический университет им.А.Н.Туполева
(КНИТУ_КАИ), Казань, Россия*

artem.safin.1999@gmail.com

Термопласты, армированные непрерывным углеродным волокном, считаются предпочтительным альтернативным материалом углепластикам на основе термореактивных связующих благодаря более высокой ударной прочности, химстойкости и др.. Однако из-за ограниченной деформации, допускаемой для армирующих волокон, производимые в настоящее время термопластичные компоненты имеют довольно простую геометрию, что делает соединение обязательным этапом в процессе их производства. Сварка, как соединение двух частей путем сплавления их контактных поверхностей с последующим охлаждением под давлением, позволяет эффективно выполнить такое соединение. В качестве эффективного метода нагрева для сварки, композитов на основе термопластичной матрицы и углеткани является саморезистивный электрический нагрев при пропускании электрического тока через углеткань.

В этом исследовании были проведены поверхностная сварка углепластиков на основе полипропилена при саморезистивном электрическом нагреве. В работе были изучены характеристики джоулевого нагрева и поведения уплотнения ламината из полипропилена марки PP01030, армированного углеродной тканью при нагревании. Была проведена серия экспериментов, чтобы установить взаимосвязь между геометрическими размерами, плотностью тока и температурным откликом образца, а также зависимость между скоростью подъема температуры и плотностью тока ламината с тканью саржевого переплетения и температурной эволюцией образцов с различной степенью наполнения. Кроме того, изучено поведение образцов при уплотнении при различных давлениях и скоростях его приложения. Были проведены испытания на сдвиг сваренных швов полученных при различных температурах, давлении, времени выдержки, скорости охлаждения. Проанализированы влияние параметров на прочностные свойства и выполнена оптимизация технологических параметров с учетом реологических исследований расплава полипропилена и процесса его кристаллизации методом дифференциально-сканирующей калориметрии.

ПРИМЕНЕНИЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ И ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ФОРМ РАБОТЫ НА УРОКАХ ХИМИИ

А.И. Сафиуллина, И.Д. Низамов

Химический институт им. А.М. Бутлерова К(П)ФУ, Казань, Россия

alina.safiullina555@gmail.com

Важнейшей задачей школы является формирование у обучающихся познавательной активности и творческой инициативы, повышение желания их к участию в общественной жизни, выработка общественно значимых черт личности. Для реализации этого на уроках важно использование как коллективной, так и индивидуальной формы обучения. Для повышения мотивации у обучающихся учитель прибегает к коллективной форме работы, где у каждого в процессе обсуждения проблемы развиваются навыки мыслительного процесса, идет активизация и актуализация предыдущего опыта и знаний, а также происходит процесс включения памяти. В коллективе у учащихся воспитывается взаимоуважение, улучшается психологический комфорт в группе, к тому же усваивается больший объем материала [1]. Нельзя забывать, что сейчас учителя в соответствии с ФГОС начали применять в своей профессиональной деятельности технологию индивидуализированного обучения. Данная форма организации обучения предполагает проектирование педагогической деятельности на основе личностных качеств обучающегося, то есть его способностей, уровня знаний, потребностей, уровня интереса и других качеств обучающегося. Индивидуальный подход применяется чаще всего в организации самостоятельной, контрольной работы, учитель разрабатывает задания с учетом возможностей каждого учащегося.

Таким образом, коллективная и индивидуальная формы обучения взаимосвязаны друг с другом. Чтобы повысить интерес к изучению химии учителю важно применять обе формы, так как каждый вытекает из другого. При применении данных форм обучения класс оживляется, занимается учебным процессом с большим интересом.

1. Береснева Е. В. Современные технологии обучения химии: Учебное пособие. – М.: Центрхимпресс, 2004. – 144 с.

КОМПОЗИТ НИКЕЛЬ-ПАЛЛАДИЙ НА ВОССТАНОВЛЕННОМ ОКСИДЕ ГРАФЕНА И ЕГО ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА В РЕАКЦИИ ЭЛЕКТРОЛИЗА ВОДЫ

А.В. Свалова, А.М. Димиев

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

AnVSvalova@kpfu.ru

Водород как энергоноситель является перспективной альтернативой углеводородному топливу, так как он является экологичным и возобновляемым ресурсом, а энергетика на его основе высокоэффективна. Однако существенным препятствием на пути распространения этой технологии является дорогостоящие платиновые и палладиевые катализаторы, применяемые при получении водорода электролизом воды [1]. Частичная замена благородных металлов на менее дорогостоящий переходный металл позволяет снизить расход платины и палладия, а создание носителя для биметаллических систем из оксида графена способствует стабилизации металлов на поверхности и улучшению их распределение за счёт связывания с многочисленными кислородными группами носителя [2].

Целями данного исследования стали синтез никель-палладиевого композита на восстановленном оксиде графена (Ni-Pd/rGO), выявление структурных особенностей композита с помощью таких методов исследования, как СЭМ, ПЭМ в светлом поле и ЭДС, а также оценка электрохимической активности Ni-Pd/rGO по отношению к реакции выделения водорода в кислой среде.

В результате было установлено, что металлический компонент на поверхности носителя находится в двух структурных состояниях. Обнаруженные на снимках ПЭМ в светлом поле наночастицы с размерами 5-10 нм представляют собой смешанные кристаллы, в которых никель постепенно внедряется в кристаллическую решётку палладия. Наряду с этим, никель находится за пределами наночастиц, равномерно покрывая поверхность носителя. Электрохимические исследования показали, что полученная система обладает большей электрохимической активностью по сравнению с монометаллическими системами, содержащими отдельно никель или палладий на восстановленном оксиде графена.

1. Hegazy, M.B. Synergistic electrocatalytic hydrogen evolution in Ni/NiS nanoparticles wrapped in multi-heteroatom doped reduced graphene oxide nanosheets / M.B. Hegazy, M.R. Beber [et al.] // Applied materials & interfaces. – 2021. – P. 34043-34052
2. Huangqing, Y. PdCu alloy nanoparticles supported on reduced graphene oxide for electrocatalytic oxidation of methanol / Y. Huangqing, L. Yunming [et al.] // Chemical routes to materials. – 2018.

МИКРОВОЛНОВЫЙ СИНТЕЗ – НОВЫЙ ПОДХОД К ПОЛУЧЕНИЮ α -ГИДРОКСИФОСФОНАТОВ

А.Н. Седов, Р.Р. Давлетшин, Н.В. Давлетшина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

sedandrey1998@gmail.com

Важнейшим методом синтеза α -гидроксифосфонатов является реакция Абрамова. В последние годы в получении α -гидроксифосфонатов стали использоваться методы «зеленой химии», принципам которой и соответствует метод микроволнового синтеза ввиду высокой скорости реакции, отсутствие растворителей и др. [1, 2]

В настоящей работе мы осуществили две серии синтезов в растворителях различной природы: бензоле, пропанол-2 и ацетонитриле в условиях их микроволновой активации с участием 3-метокси-4-гидроксibenзальдегида (серия **I**) и 4-бромбензальдегида (серия **II**); фосфорилирующим агентом в обоих случаях выступал O,O-диэтилфосфит. В качестве катализаторов использовали триэтиламин и п-толуолсульфокислоту (p-TolSO₃H). Реакции серии **I** проводили в течение 10 мин при 120°C, с 10 мол % катализатора, для серии **II** время проведения синтеза составило 5 мин, температура 110°C, с тем же содержанием катализатора. Степень превращения продуктов определяли методом ЯМР ³¹P по возрастанию интенсивности сигнала (таблица 1); ИК-спектрометрический метод использовали для дополнительного мониторинга.

Таблица 1 – Степень превращения продуктов реакции серии **I** и **II**

Растворитель Катализатор	C ₆ H ₆		i-PrOH		CH ₃ CN	
	I	II	I	II	I	II
Et ₃ N	2.0	23.7	4.8	63.6	3.8	19.3
p-TolSO ₃ H	13.8	17.4	18.0	24.5	9.1	18.7

Установлено, что в пропанол-2 для серии α -гидроксифосфонатов на основе 3-метокси-4-гидроксibenзальдегида (серия **I**) наибольшая степень превращения фосфита наблюдалась при использовании кислотного катализа, в то время как для серии на основе 4-бромбензальдегида (серия **II**) более благоприятен основной катализ триэтиламинол.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

1. G.Brahmachari, I. Karmakar Arkivoc 2022, **part iii**, P. 0-0.
2. P. R. Varga, A. Belovics, P. Bagi, et. al. Molecules, 2022, **27**, 7, P. 2067.

ПОНИЖЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ ВЕЩЕСТВ С НЕОБРАТИМЫМ ЭНАНТИОТРОПНЫМ ПОЛИМОРФНЫМ ПЕРЕХОДОМ

А.В. Симдянова, М.Н. Габдулхаев, В.В. Горбачук, М.А. Зиганшин, А.В. Некрасов

Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

kemovaanastasia565@gmail.com

Приготовление аморфных форм из расплава является одним из важных приемов приготовления биодоступных лекарственных форм, пленок, применимых в фотолитографии и органических светодиодах [1]. Этот способ имеет ограничения в тех случаях, когда образец при нагреве разлагается вблизи равновесной температуры плавления [2]. Для решения этой проблемы необходимо обеспечить достаточно быстрый нагрев, при котором образец не успеет разложиться при плавлении или понизится его температура плавления. Последнее может быть реализовано, если вещество при нагреве испытывает полиморфный переход.

В настоящей работе изучена возможность понижения температуры плавления веществ, испытывающих при нагреве эндотермический (энантиотропный) полиморфный переход, путем сверхбыстрого нагрева. Макроциклическое соединение – каликсарен **1** и лекарственное вещество с относительно малой молекулой – кофеин, рисунок 1, были выбраны в качестве объектов исследования. С применением обычной дифференциальной сканирующей калориметрии был разработан способ прогнозирования возможности понижения температуры плавления веществ с необратимым энантиотропным полиморфным переходом при сверхбыстром нагреве. Результаты расчета были экспериментально подтверждены методом высокоскоростной сканирующей калориметрии.

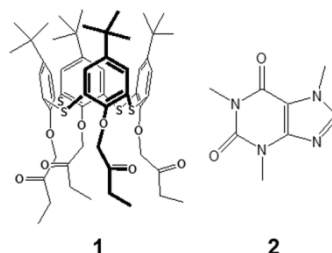


Рисунок 1 – Структура объектов исследования.

1. K.V. Gataullina et al., *Cryst. Growth Des.*, 2017, 17, 3512.
2. M.N Gabdulkaev et al., *CrystEngComm.*, 2020, 22, 7002.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЕМОНСТРАЦИОННОГО ХИМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА НА УРОКАХ ХИМИИ

Е.П. Слинченко

Химический институт им. А.М. Бутлерова (КФУ), Казань, Россия

eslinchenko@inbox.ru

Теоретические знания всегда требуют подкрепления их наглядными опытами, позволяющими легче и быстрее усвоить изучаемый материал. В химии в этих целях используется демонстрационный химический эксперимент, который занимает одно из ведущих мест при изучении данной экспериментально-теоретической науки.

Изучив статьи Г.И. Греченко, К.П. Корнуковой и М.Е. Дядищева, выступление J.H. Purnell, был сделан вывод, что наиболее близким нам является мнение J.H. Purnell. Он считает, что демонстрационный эксперимент имеет значительное влияние на развитие интереса учеников к изучению химии, который выступает одним из основных двигателей процесса обучения.

Существует множество достоинств демонстрационного эксперимента, например: наглядность, возможность управления вниманием учеников, экономия времени и реактивов.

По нашему мнению, самое важное достоинство – наглядность. Во время прохождения практики в СУНЦ ИТ-лицее КФУ, в ходе которой активно использовались демонстрационные эксперименты, было отмечено, что они способствуют активизации обучающихся, включению всего класса в активную работу.

Также была доказана эффективность использования демонстрационного эксперимента с точки зрения усвоения знаний обучающимися. Класс, в котором объяснение новых тем регулярно подкреплялось демонстрационным экспериментом, показал лучшие результаты по сравнению с классом, в котором обучающимся давалась только теория.

На основании вышесказанного можно сделать вывод, что демонстрационный эксперимент является важной составляющей урока химии.

1. Lister, T. Classic Chemistry Demonstrations. Royal Society of Chemistry, 1995. [Электронный ресурс]. – https://books.google.co.uk/books?hl=ru&lr=&id=4x7QHE7sm2gC&oi=fnd&pg=PP9&dq=demonstration+chemistry+experiment+in+school&ots=wOsOX_eEE5&sig=C8u4WXCb0NRDhkOw2yazNoV30Q4&redir_esc=y#v=onepage&q=demonstration%20chemistry%20experiment%20in%20school&f=false

МОДИФИКАТОРЫ НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀ И НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ ДЛЯ ИММУНОХИМИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ АМИТРИПТИЛИНА

А.А. Смирнова, Д.В. Брусницын, А.Н. Рамазанова, Э.Р. Газизуллина, Э.П. Медянцева

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

sanna3501@gmail.com

На сегодняшний день наблюдается непрерывный рост публикаций, описывающих использование композитов как модификаторов поверхности электродов для определения лекарственных препаратов, что связано с возможностью расширения аналитических характеристик разрабатываемых биосенсоров. Особый интерес представляет количественный анализ действующего вещества - трициклического антидепрессанта в лекарственном препарате «Амитриптилин».

Разработаны амперометрические иммуносенсоры на основе электродов, модифицированные фуллереном C₆₀ в сочетании с электрохимически осажденными наночастицами никеля для определения трициклического антидепрессанта - амитриптилина в лекарственном препарате «Амитриптилин». Проведено исследование морфологии поверхности электрода методом атомно-силовой микроскопии. Установлено, что нанесение модификатора на основе фуллерена C₆₀ и наночастиц никеля происходит равномерно на поверхности электрода.

В качестве аналитического сигнала выбран ток окисления наночастиц никеля в присутствии антител против трициклических антидепрессантов, в случае добавления антигена (амитриптилина) к иммуносенсору происходит уменьшение аналитического сигнала при образовании комплекса антиген-антитело.

Аналитические возможности показывают, что для иммуносенсора на основе электрода, модифицированного фуллереном C₆₀ в дисперсии хитозана в сочетании с наночастицами никеля наблюдаются наиболее широкая область рабочих концентраций $1 \times 10^{-4} - 1 \times 10^{-9}$ моль/л, нижняя граница определяемых концентраций на уровне 5×10^{-10} моль/л при разведении антител 1:50.

Проведено определение амитриптилина амперометрическими иммуносенсорами в лекарственном препарате «Амитриптилин» с относительным стандартным отклонением не более 0.076.

КОНСОЛИДАЦИЯ ПЛАСТИН И ТЕРМОФОРМОВАНИЕ ИЗДЕЛИЙ ИЗ УГЛЕПЛАСТИКА НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА

Д.А. Чаликов, Р.И. Соловьев, Л.М. Амирова

*Казанский национально – исследовательский технический университет им.А.Н.Туполева
(КНИТУ_КАИ), Казань, Россия*

rilov992@mail.ru

В последние годы наблюдается повышенный интерес к производству изделий из композиционных материалов на основе термопластичных матриц армированных углетканями, технология их изготовления может быть легко автоматизирована благодаря разработкам, близким к технологиям формования листовых материалов. Кроме того, более высокая ударпрочность, а также их ремонтпригодность и возможность вторичной переработки обеспечивают большую конкурентоспособность по сравнению с композитами с терморезактивными матрицами.

Данная работа посвящена разработке безавтоклавной технологии формирования консолидированных пластин на основе термопластичной матрицы и оптимизации режимов термоформования изделий с предварительным компьютерным моделированием в программном пакете РАМ-FORM. Для получения консолидированных пластин была использована технология вакуумного формования из углеткани саржевого плетения и экструдированных пленок полипропилена марки PP01030, оптимизированы режимы получения консолидированных пластин с минимальным содержанием пустот и высокой степенью наполнения углетканью. Для полученных пластин определены жесткостные, деформационные и другие необходимые характеристики для моделирования процесса термоформования в программном пакете РАМ-FORM. По рассчитанным оптимальным параметрам проведено термоформование модельных изделий и проведена верификация модели. Проведены прочностные исследования углепластика сформованного при оптимальных режимах и показано значительное влияние режима охлаждения материала, следовательно, условий кристаллизации полипропилена, на прочностные характеристики. Методом дифференциально-сканирующей калориметрии проведено изучение процесса кристаллизации полипропилена, определены теплоемкость и теплопроводность углепластика при различных температурах с целью оптимизации режима нагрева и охлаждения материала. В результате проведенных комплексных исследований оптимизированы температурно-временные и деформационные параметры консолидации и термоформования углепластика на основе полипропилена.

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ОЛЕИНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ПРОЦЕСС ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА МЕТОДОМ ТЕРМОЛИЗА

А.Н. Солодов, А.А. Головизнин, А.А. Платонова, Э.Ф. Хаметшина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

sanya.solodiv@live.com

В течение последних десятилетий синтез нанокристаллов с контролируемыми размерами интенсивно развивался не только из-за их фундаментального научного интереса, но и из-за широких перспектив применения однородных по размеру нанокристаллов поскольку их свойства напрямую зависят от их размеров.

Значительные успехи в крупномасштабном синтезе коллоидных нанокристаллов одинакового размера связано с развитием метода термического разложения олеатных комплексов, однако понимание механизма образования нанокристаллов методом термического разложения все еще очень мало изучено.

Образование наночастиц оксида железа, полученных при термическом разложении железоолеатных комплексов, было изучено методом ЯМР-релаксации, позволяющим отслеживать средний диаметр наночастиц. Анализ зависимостей отношения времен релаксации от времени нагревания реакционной смеси показал, что в зависимости от присутствия в растворе олеиновой кислоты процессы зародышеобразования и роста наночастиц могут протекать по двум направлениям: непрерывно без разделения стадии зародышеобразования или дискретно с разделением зародышеобразования и рост наночастиц. В случае избытка олеиновой кислоты процесс зародышеобразования следует известной модели LaMer, характеризующейся взрывным зародышеобразованием и разделением зародышеобразования и роста нанокристалла при непрерывной подаче мономера, а в ее отсутствие - зарождение и рост наночастиц не разделены и протекают непрерывно, то есть олеиновая кислота действует как «запал» для «взрывного зародышеобразования». Этот новый подход показывает, что метод «горячего впрыска» можно осуществлять не только механически (путем введения прекурсора в реакционную систему), но и химически, с помощью реагента, который изначально находится в системе.

ПРОЦЕСС КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ЖЕЛЕЗА(III) С РЯДОМ ОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ПЭИ

А.Н. Солодов, Д.А. Нежелская, В.А. Модина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

sanya.solodiv@live.com

Особый интерес среди пленочных слоистых структур с уникальными магнитными и оптическими свойствами, которые могут быть использованы и в качестве селективных электродов на органические объекты, и в качестве катализаторов и оптических устройств, представляют металлоорганические пленки на основе комплексов Fe(III) с производными пирокатехина и салициловой кислоты, стабильные при pH 4-8. Существование подобных структур отмечено и в живом мире: мидии способны «прирастать» к различным объектам благодаря полидофаминовому слою, адгезия которого определяется образованием комплексов железа(III).

В качестве полимерных матриц для пленкообразования можно выбрать водорастворимые полимеры, способные связывать ионы металлов или их комплексы, например, полиэтиленимин (PEI) с катионной функцией выступающий в роли хелатного агента для связывания анионных комплексов.

Методом электронной спектроскопии определены состав, константы равновесия образования и спектральные параметры комплексов железа(III) с рядом ароматических кислот (салициловой кислотой (SA); 2,4-, 3,4- и 2,6-доксибензойными кислотами (DHB) в воде и водном растворе PEI. Добавки PEI стимулируют образование анионных *трис*-комплексов, образуемых железом(III) с SA, 2,4-DHB, 3,4-DHB и 2,6-DHB в более кислой среде по сравнению с водой. При этом комплексы $[FeHL]^+$ для всех трех лигандов непосредственно превращаются в *трис*-комплексы. В щелочной среде наблюдаемые в растворах полимера изменения спектров (падение интенсивности и батохромный сдвиг) объяснены замещением в составе *трис*-комплексов одного аниона лиганда хелатным фрагментом PEI (NN) с образованием разнолигандного комплекса $[Fe(HL)_2(NN)]$ вследствие потери катионного характера полиэтиленимина. Максимальный эффект стабилизации *трис*-комплексов наблюдался для PEI с наибольшей молекулярной массой.

АМФИФИЛЬНЫЕ N-ОЛИГОЭТИЛЕНГЛИКОЛЬМИДАЗОЛ-ПРОИЗВОДНЫЕ КАЛИКС[4]АРЕНЫ КАК СЕНСОРЫ НА АДЕНОЗИНФОСФАТЫ

Э.Д. Султанова^a, А.А. Федосеева^a, З.Э. Исакова^a, Е.А. Очереднюк^a, И.М. Богданов^a,
С.Е. Соловьева^{a, b}, И.С. Антипин^{a, b}

^aХимический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань

^bИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань

elsultanova123@gmail.com

Впервые синтезированы амфифильные каликс[4]арены, содержащие N-олигоэтиленгликольимидазольные фрагменты по верхнему ободу и алкильные по нижнему. Проведен сравнительный анализ ККА с использованием двух типов красителей – пирена и флуоресцеина, а также выявлено преагрегатное и полное агрегатное состояние каликсаренов с различной длиной алкильных и оксиэтильных фрагментов. Установлено, что система каликсарен-флуоресцеин по-разному изменяет оптическую плотность и колориметрический отклик в отношении различных аденозинфосфатов: краситель связан гидрофобной и гидрофильной частью макроцикла, а добавление аденозинов приводит к различному переходу флуоресцеина и, следовательно, к разному виду спектров.

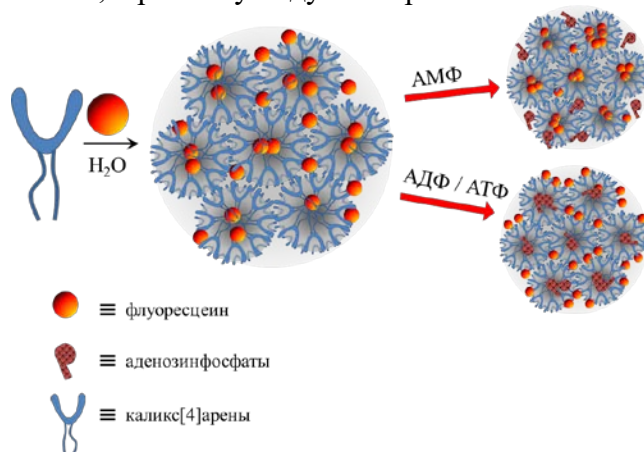


Схема связывания аденозинфосфатов системой каликсарен-флуоресцеин.

Таким образом, полученные амфифилы перспективны для использования в биотехнологии как для создания средств доставки гидрофобных субстратов, так и для создания невирусных векторов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-73-00100.

СИНТЕЗ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ГИДРОКИНОН-ФОРМАЛЬДЕГИДНЫХ ГЕКСАМЕРОВ И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С МОДЕЛЬНЫМИ ТРАНСПОРТНЫМИ БЕЛКАМИ

Д.И. Стойков, Л.И. Махмутова, Д.Н. Шурпик, И.И. Стойков

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

da.stoykov@mail.ru

На сегодняшний день одним из направлений исследований в области медицинской химии является разработка систем адресной доставки лекарственных средств. [1] Особое место среди таких систем занимают полифункциональные соединения, обладающие флуоресцентными свойствами и способностью к связыванию различных по природе аналитов. Ациклические полифункциональные аналоги макроциклов, обладают конформационно подвижной структурой, что позволяет реализовывать принцип индуцированного соответствия в молекулярном распознавании. [2]

В данной работе нами были получены водорастворимые пиллар[n]арены и ациклический гексамерный аналог, содержащие фрагменты N-метилимидазола. Обнаружены самоассоциаты водорастворимого гексамера в фосфатном буфере при pH=7.4 со средним диаметром частиц 141 нм. Изучены закономерности влияния на взаимодействие с белками: лизоцимом, бычьим сывороточным альбумином и гемоглобином.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-00070.

Регистрация ЯМР и масс-спектров проводилась за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

1. Marasini N., Haque S., Kaminskas L. M. Polymer-drug conjugates as inhalable drug delivery systems: A review // Curr. Opin. Colloid Interface Sci. 2017, №31, P. 18-29.
2. Schneider, H.J. Binding Mechanisms in Supramolecular Complexes / H.J. Schneider // Angew. Chem. Int. Ed. – 2009. – V. 48. – № 22. – P. 3924-3977.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИ ИНДУЦИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ АНИЛИДОВ И *N*-БЕНЗИЛАМИДОВ С УЧАСТИЕМ НИТРИЛОВ И АМИНОКИСЛОТ

С.О. Стрекалова^а, А.И. Кононов^{а,б}, Ю.Г. Будникова^{а,б}

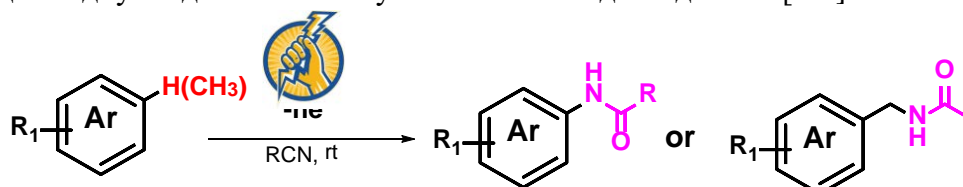
^а ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

^б Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

so4nar36@yahoo.com

Ароматические и гетероароматические соединения, содержащие в своем составе амидные фрагменты, находят широкое применение в органическом синтезе, медицинской химии, химии материалов, агрохимии, катализе и т.д. [1]. Интерес к электрохимическим реакциям обусловлен рядом факторов: мягкими условиями (комнатная температура, нормальное давление), возможностью проведения реакции в практически замкнутой системе с минимальным количеством реагента-катализатора, высокой экологической безопасностью, особенно по сравнению с традиционными методами синтеза.

Была проведена серия реакций электроокисления ряда ароматических субстратов (бензол и его производные) с участием нитрилов и аминокислот, в результате были получены анилиды и *N*-бензиламиды в одну стадию в мягких условиях с выходами до 80% [2-3].



Методом ЦВА изучены электрохимические свойства исходных субстратов, предложен предполагаемый механизм протекающих процессов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 22-13-00017.

1. Mahesh S., Tang K.C., Raj M. *Molecules.*, **2018**, 23(10), 2615.
2. Strekalova S., Kononov A., Rizvanov I., Budnikova Y. *RSC Adv.*, **2021**, 11, 37540-37543.
3. Strekalova S., Kononov A., Budnikova Y. *Tetrahedron Lett.*, **2022**, 102, 153917.

НОВЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ D-/F-КОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ С ИМИНОФЕНОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ

Ю.В. Стрельникова^{a,b}, И.Д. Шутилов^b, А.А. Иова^b, А.С. Агарков^{a,b}, М.В. Князева^a,
А.С. Овсянников^a, Д.Р. Исламов^a, А.Т. Губайдуллин^a, И.А. Литвинов^a,
С.Е. Соловьева^{a,b}, И.С. Антипин^{a,b}

^a Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

^b Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^c Национальный Исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

JStrelnikova@yandex.ru

Супрамолекулярная химия привлекает все большее внимание благодаря возможности конструирования молекулярных материалов, обладающих заданными свойствами. Благодаря наличию жесткой структуры, а также возможности введения различных по природе заместителей (тия)каликс[4]арены являются привлекательной платформой для образования комплексов с катионами *d*- и *f*- металлов, потенциально обладающих магнитными [2], каталитическими свойствами [3], а также свойствами спин-кроссовера [4].

В настоящей работе представлен синтез полиидентатных оснований Шиффа саленового типа и их комплексов с катионами Fe(III), Ni (II), Pd (II) и Dy (III).

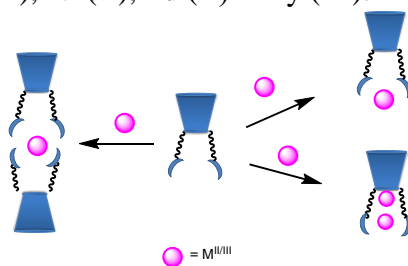


Рисунок 1 – Структурный мотив комплексов производных (тия)каликс[4]аренов с катионами *d*- и *f*-металлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-10139.

1. G. Karotsis, S. J. Teat, W. Wernsdorfer, S. Piligkos, S. J. Dalgarno, E. K. Brechin. *Angew. Chem.* **2009**, *121*, 8435-8438.
2. Gogoi, A. Dewan, G. Borah, U. Bora. *New J. Chem.* **2015**, *39*, 3341-3344.
3. Wan S., Li M., Zhang, Z., Xi H., Yang H., Luo Q., Zhu W. H. *Sci. China Chem.* **2020**, *63*, 1191-1197.

СИНТЕЗ И АНТИХОЛИНЭСТЕРАЗНАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,3-БИС(АЛКИЛАМИНО)-6-МЕТИЛУРАЦИЛОВ

Э.Г. Сулейманов^{a,b}, В.Э. Семёнов^b, М.М. Шулаева^b

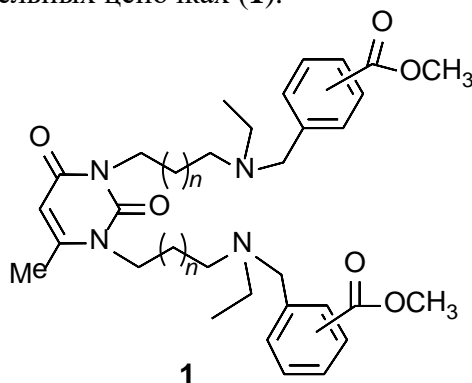
^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Казань, Россия

eduard20001101929@gmail.com

Производные урацила обладают разноплановой высокой биологической активностью. Помимо направления, связанного с синтезом функционализированных по различным кольцевым атомам производных урацила, успешно разрабатывается подход, в котором производное урацила связывается посредством линкера с фармакофорными фрагментами, призванными обеспечить средство полученного таким образом конъюгата к определенной биомишени.

Этот подход оказался плодотворным в поиске потенциальных ингибиторов холинэстераз. Таким методом нами получены различные производные 6-метилурацила - 1,3-бис[α , ω -(*мета*- и *пара*-метоксикарбонилбензиламино-этил)алкил]-6-метилурацилы с варьируемым числом метиленовых групп в соединительных цепочках (**1**).



У синтезированных конъюгатов 6-метилурацила с аминобензильными фрагментами определялись среднеэффективные концентрации IC₅₀ в отношении холинэстераз – АХЭ и БуХЭ, а также индекс селективности SI. Исследования антиацетилхолинэстеразной активности полученных соединений показали, что они являются высокоэффективными и селективными ингибиторами АХЭ, они умеренно токсичны или малотоксичны, способны проходить через ГЭБ и эффективно ингибировать АХЭ мозга мышей.

Структура соединений подтверждена данными ЯМР ¹H и ¹³C-спектроскопии и масс-спектрометрии MALDI-TOF.

ДЕКАЗАМЕЩЕННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНА С АМИНОКИСЛОТНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: НАНОРАЗМЕРНЫЕ ЧАСТИЦЫ С ФЛУОРЕСЦЕИНОМ

В.Р. Султанаев, Л.С. Якимова, А.А. Назарова, И.И. Стойков

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

vildan_sultanaev@mail.ru

В настоящее время привлекательными для изучения являются наночастицы на основе флуоресцеина, в которых краситель выступает в качестве модели лекарственного препарата или флуоресцентной метки. В большинстве подобных систем флуоресцеин ковалентно связан с органической молекулой или неорганической подложкой, что затрудняет его высвобождение. Пиллар[5]арен, являющийся удобной макроциклической платформой для функционализации, открывает возможности для создания конформационно лабильных производных и образования наноразмерных частиц за счет нековалентных взаимодействий [1].

В данной работе были синтезированы деказамещенные производные пиллар[5]арена, содержащие фрагменты *L*-триптофана и *L*-фенилаланина, для получения наночастиц на основе флуоресцеина и изучения влияния природы заместителя в структуре макроцикла на свойства флуоресцирующих систем.

Комплексом физических методов было показано образование разных типов ассоциатов с флуоресцеином с размерами 92 ± 1 ($\log K_a = 3.19$) и 79 ± 1 ($\log K_a = 5.08$) нм для макроциклов, содержащих фрагменты *L*-триптофана и *L*-фенилаланина соответственно. Показано, что наночастицы на основе флуоресцеина и пиллар[5]арена с фрагментами фенилаланина характеризуются большей стабильностью ($\zeta = 32 \pm 2$ мВ) и спонтанным увеличением эмиссии при эквимолярном соотношении компонентов.

Подобные наноразмерные системы могут быть использованы в качестве перспективных систем доставки терапевтических агентов и лекарств, а конформационно лабильная структура макроциклов с заряженными фрагментами – для контроля процессов связывания и высвобождения субстратов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-73-10094, <https://rscf.ru/project/18-73-10094/>.

1. A.A. Nazarova, L.S. Yakimova, P.L. Padnya, V.G. Evtugyn, Y.N. Osin, P.J. Cragg, I.I. Stoikov. *New J.Chem.*, 2019, **43**, 14450–14458.

АКТИВНЫЙ МЕМБРАННЫЙ ТРАНСПОРТ ИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ГЕКСИЛ [(N-БЕНЗИЛ-N,N-ДИОКТИЛАММОНИО)МЕТИЛ]ФОСФОНАТОМ

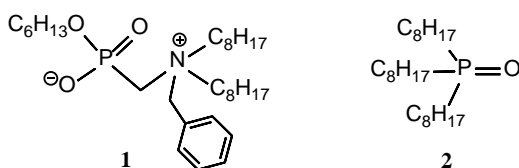
Д.Р. Султанова, Н.В. Давлетшина, Р.А. Черкасов

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

diana.sultanova.02@yandex.ru

В последнее время большое внимания уделяется мембранной технологии, как методу разделения ионов редкоземельных металлов. По сравнению с традиционными методами мембранные процессы имеют высокую селективность, простую эксплуатацию и низкие энергозатраты [1, 2].

В настоящей работе в качестве переносчиков использовались фосфорилированный бетаин - гексил [(N-бензил-N,N-диоктиламмоний)метил]фосфонат – **1** и промышленный экстрагент – триоктилфосфиноксид **2**.



В качестве мембранного растворителя использовали 1,2-дихлорбензол. В таблице 1 представлены результаты изучения активного мембранного транспорта РЗЭ в оптимизированных условиях переносчиками **1** и **2**.

Таблица 1 – Мембранная экстракция М (III): $V_{пр} = 30$ мл; C_0 (РЗЭ) = $2.2 \cdot 10^{-3}$ моль/л, C (KNO_3) = 0.25M, $C_{пер} = 0.1$ M; $t_{экс} = 100-120$ мин

	P · 10 ⁶ м/с										
	La	Ce	Pr	Nd	Sm	Eu	Gd	Dy	Ho	Er	Y
1	6.3	10.4	5.3	4.4	1.4	8.0	7.5	8.2	5.0	2.9	5.6
2	3.0	2.8	3.3	4.9	7.0	4.1	4.3	4.0	4.3	2.8	4.0

Установлено, что исследуемый переносчик **1** имеет сравнимые значения проницаемостей с промышленным переносчиком **2** в транспорте ионов празеодима, неодима, гольмия, эрбия и иттрия. Для некоторых металлов наблюдается двухкратное увеличение значения проницаемости, что свидетельствует о перспективности дальнейшего исследования фосфорилированного бетаина **1**.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00335, <https://rscf.ru/project/22-23-00335/>

1. F. Xie, T.A. Zhang, D. Dreisinger // Miner. Eng., 2014, **56**, P. 10–28.
2. D.Q. Li // J. Rare Earths., 2017, **35**, 2, P. 107–119.

ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ АММОНИЕВЫЕ СОЛИ НА ОСНОВЕ ТИАКАЛИКСАРЕНА: СИНТЕЗ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ

О.С. Терентьева^a, П.Л. Падня^a, Ю.Г. Штырлин^a, И.И. Стойков^{a,b}

^a КФУ, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

^b ФГБНУ Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности, Казань, Россия

olga-potrekeeva@mail.ru

Поиск новых антибактериальных и антисептических препаратов является актуальной задачей в связи с устойчивостью микроорганизмов к существующим лекарствам. В последние годы активно развивается медицинская химия макроциклических соединений. Создание лекарств на основе макроциклов возможно благодаря их уникальным физико-химическим свойствам, таким как пространственная предварительная организация, наличие гидрофобной полости и гидрофильных заместителей, низкая токсичность, отсутствие аллергенных свойств и др.

Тиакаликсарен - аналог «классического» каликсарена, в котором метиленовые группы между ароматическими кольцами заменены на атомы серы. Увеличение количества аммониевых фрагментов в структуре макроцикла может привести к увеличению антибактериальной активности в отношении грамположительных и грамотрицательных бактерий, в том числе резистентных. Таким образом, полифункциональные макроциклические соединения на основе тиакаликсарена, содержащего четвертичные аммониевые фрагменты, представляют безусловный интерес для разработки высокоэффективных и безопасных антибактериальных и антисептических средств.

В данной работе были получены тетразамещенные производные тиакаликс[4]арена, содержащих в своей структуре четвертичные аммониевые фрагменты с различной длиной заместителя. Изучена их антибактериальная активность в отношении библиотечных штаммов и клинических изолятов грамположительных (*S. aureus*, *S. epidermidis*, *B. subtilis*) и грамотрицательных (*E. coli*, *Kl. Pneumonia*, *Ps. Aeruginosa*) бактерий. Исследована цитотоксичность полученных соединений с помощью МТТ-теста на клетках фибробластов кожи человека (HSF).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 19-73-10134

ГЛИЦИДИЛОВЫЕ ЭФИРЫ АЛКАНОЛОВ В СИНТЕЗЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ ТРИФЕНИЛАРСОНИЕВЫХ СОЛЕЙ

Е.А. Титов^{a,b}, А.В. Немтарёв^{a,b}, В.Ф. Миронов^{a,b}

^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

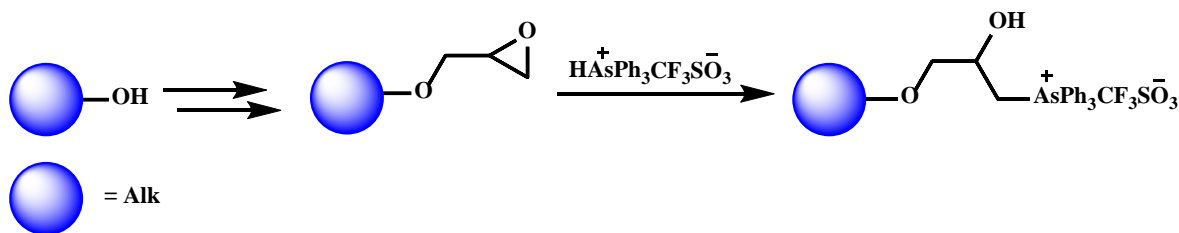
^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ КазНЦ РАН Казань, Россия

EvATitov@kpfu.ru

Антибактериальные и противоопухолевые агенты, несущие жирные алкильные фрагменты успешно и широко используются в наши дни. Наиболее часто можно встретить такие заместители как лаурил- ($C_{10}H_{21}$ -), миристил- ($C_{12}H_{25}$ -) и цетил- ($C_{16}H_{33}$ -) за счёт своей доступности и распространённости в природном сырье соответствующих спиртов.

Направленная модификация биологически активных молекул триарилфосфониевым или триариларсониевым фрагментами применяется для их таргетной доставки в митохондрии за счёт липофильности и наличия делокализованного положительного заряда [1]. Эта особенность позволяет модифицированным конъюгатам преодолевать мембраны клеток и органелл, характеризующиеся большими значениями трансмембранного потенциала [2].

В работе описан оптимальный подход синтеза в мягких условиях биологически активных арсониевых солей, несущих длинные алкильные фрагменты, используя глицидиловые эфиры в качестве промежуточных продуктов [3].



Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства КФУ («Приоритет – 2030»)

1. Windsor, M. S. A.; Busse, M.; Morrison, D. E.; Baker, R. W.; Hill, L. R.; Rendina, L. M. *Chem. Commun.* **2021**, 57 (70), 8806–8809.
2. Zielonka J., Joseph J., Sikora A., Hardy M., Ouari O., Vasquez-Vivar J., Cheng G., Lopez M., Kalyanaraman B. *Chem. Rev.*, **2017**, 117(15), 10043-10120.
3. Mironov V.F.; Nemtarev A.V.; Tsepaeva O.V.; Dimukhametov M.N.; Litvinov I.A.; Voloshina A.D.; Pashirova T.N.; Titov E.A.; Lyubina A.P.; Amerhanova S.K.; Gubaidullin A.T.; Islamov D.R. *Molecules* **2021**, 26 (21), 6350.

МЕЗОПОРИСТЫЙ СИЛИКАГЕЛЬ, ДОПИРОВАННЫЙ ДИСПРОЗИЕМ И МОДИФИЦИРОВАННЫЙ СЕРЕБРОМ, КАК СЕЛЕКТИВНЫЙ КАТАЛИЗАТОР РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ СМЕСИ ГЕКСИН-1/ГЕКСЕН-1

А.А. Токранов, Е.О. Токранова, Р.В. Шафигулин, А.В. Буланова

Самарский национальный исследовательский университет
им. Академика С.П. Королева, Самара, Россия

fileona@mail.ru

Высокий интерес к мезоструктурированным материалам кремния как к носителям для катализаторов обусловлен такими их свойствами как регулируемый размер цилиндрических пор (от 2 до 50 нм), большая площадь поверхности (700-1500 м²/г); высокую химическую и термическую стабильность. В промышленности процесс селективного гидрирования в основном используется для получения различных соединений, а также для удаления ацетиленовых соединений, которые являются нежелательными примесями и важно, чтобы содержание алкиновых примесей было снижено до минимально допустимого значения. Поэтому селективное гидрирование алкинов пока является наиболее перспективным методом очистки алкенов в присутствии примесей алкинов.

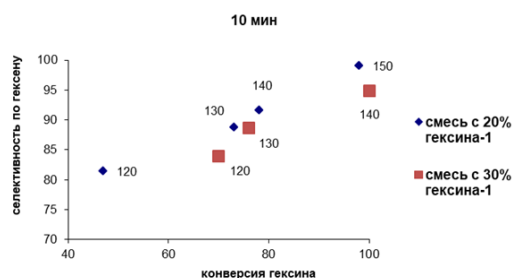


Рисунок 1 – Значение селективности по гексену-1 и конверсии гексина-1 при различных температурах на Ду-Ag/МС: а) 10 мин от начала реакции; б) 20 минут от начала реакции.

На полученном темплатным методом катализаторе Ду-Ag/МС была изучена реакция селективного гидрирования смесей гексин-1/гексен-1. Были созданы искусственные смеси с 20 и 30 % концентрацией гексина-1 в гексене-1. Реакцию проводили в течение 10 минут при температурах 100 - 140 °С.

Установлено, что Ду-Ag/МС является эффективным и селективным катализатором реакции гидрирования смеси: через 10 минут от начала реакции на Ду-Ag/МС в смеси с 20% содержанием гексина-1 его конверсия достигает максимума, а селективность по гексену-1 составляет 99.3% (рис.1). Показано, что при увеличении концентрации гексина-1 до 30% в искусственно созданной смеси катализатор Ду-Ag/МС остается высокоселективным по гексену-1 (рис.1).

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Государственного задания по гранту № FSSS-2020-0016

ХИРАЛЬНЫЕ СОЛИ О,О-ДИТЕРПЕНИЛДИТИОФOSФОРНЫХ КИЛОТ НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТ

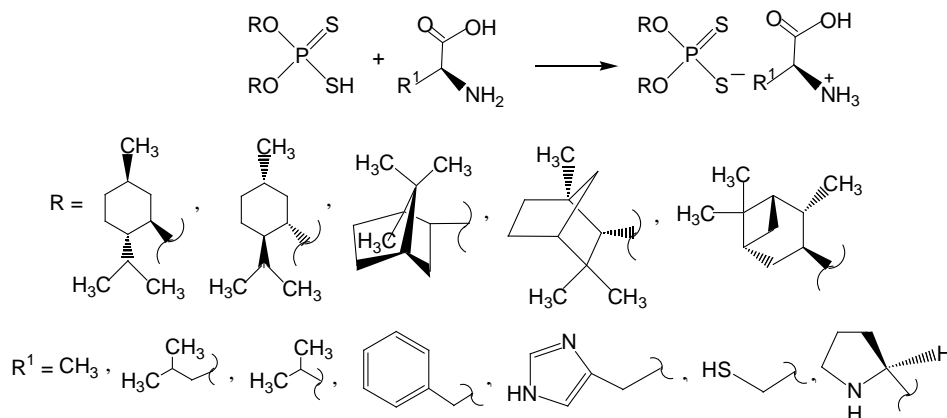
М.С. Тутуев^а, И.С. Низамов^а, Г.Р. Ахмедова^а, И.Д. Низамов^а,
Э.С. Батыева^б, Р.А. Черкасов^а

^а Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^б Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
«Казанский научный центр» РАН, Казань, Россия

mxim.tutuev@yandex.ru

Хиральные О,О-дитерпенилдитиофосфорные кислоты получены в реакциях тетрафосфордекасульфида с (1*R*,2*S*,5*R*)-(-)-ментолом, (1*S*,2*R*,5*S*)-(+)-ментолом, (1*S*)-эндо-(-)-борнеолом, (1*R*)-эндо-(+)-фенхилловым спиртом и (1*R*,2*S*,3*S*,5*R*)-(+)-изопинокамфеолом. Эти кислоты введены в реакции с протеиногенными (*S*)-(-)- α -аминокислотами в этаноле в мягких условиях. В этих реакциях при использовании (*S*)-(-)- α -аланина, (*S*)-(-)- α -лейцина, (*S*)-(-)- α -валина, (*S*)-(-)- α -фенилаланина, (*S*)-(-)- α -гистидина, (*S*)-(-)- α -цистеина и (*S*)-(-)- α -пролина синтезированы оптически активные алкиламмоний дитиофосфаты.



Полученные соли обладают высокой антимикробной активностью в отношении *Bacillus cereus*, *Staphylococcus aureus* и *Candida albicans* с зонами задержки роста микроорганизмов 30-35 мм.

ДОПОЛНИТЕЛЬНОЕ ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ И ХИМИЧЕСКИЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

К.Ш. Тюкаева

Химический институт им.А.М. Бутлерова, Казань, Россия

Kamillatyukaeva@yandex.ru

Многие со школьной скамьи пренебрегают знаниями по химии, этот предмет вызывает ужас и страх своими элементами, формулами и уравнениями. Как будущий учитель, хочется развеять миф о том, что химия – сложная, неинтересная и замысловатая наука.

Если спросить любого ученика, что для него самое увлекательное и запоминающееся в химии, все сразу же ответят «эксперимент», поэтому, использование дополнительного химического образования с применением эксперимента является актуальной темой, позволяющей углубить знания, повысить познавательный интерес учащихся и способствовать развитию критического мышления. Многие эксперименты, например искусственная кровь, вулкан, слоновья зубная паста, изготовление слайма, рост кристаллов, алхимическое золото, ученики могли видеть на просторах интернета и заинтересоваться ими, но никогда не повторить на уроках химии. Внедрение внеурочной деятельности, в которой главную роль занимают такие эксперименты будут интересны для многих учеников. Стоит добавить, что практическая роль опыта также влияет на формирование химического знания. Все процессы, происходящие вокруг нас, являются следствием химических реакций. Большая проблема заключается в том, что дети считают знания по химии ненужными и невозможными применить их в обычной жизни, но любой учитель химии поспорит и докажет, что химия - наука, окружающая нас с самого детства и применимая в любой сфере деятельности человека. Знакомство с предметом, может начаться не выходя из кухни, например определение крахмала, определение реакций среды, выведение пятен экстракцией или адсорбцией, получение растительных красителей. Одним из достоинств выбора практического направления в химическом эксперименте является то, что у ученика формируются знания, которые он сможет применять ежедневно в своей жизни.

1. Инновационные идеи и методические решения в преподавании химии: материалы VII Всероссийской научно-методической конференции (16 ноября 2016 года); Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2016. – 153 с.

ТЕРМОДИНАМИКА ОБРАЗОВАНИЯ, ЛАБИЛЬНОСТЬ И СТРУКТУРА КОМПЛЕКСОВ В СИСТЕМАХ ОКСОВАНАДИЙ(IV) – АРОМАТИЧЕСКИЕ ДИИМИНЫ – АМИНОКИСЛОТЫ

К.В. Уразаева, Н.Ю. Серов, А.И. Кузьмина, Э.М. Гилязетдинов, М.С. Бухаров, О.В. Кукушкина,
В.Г. Штырлин

*Химический институт им. А.М. Бутлерова
Казанского федерального университета, Казань, Россия*

urazaevakira19@gmail.com

Ванадий играет значительную роль в живых организмах. Известно, что частицы VO^{2+} при абсорбции через желудочно-кишечный тракт попадают в сыворотку крови, где проходят через процессы лигандного обмена, редокс-превращения, а также реакции комплексообразования. Этим обусловлено применение соединений ванадия в фармакологии, например, в виде антидиабетических препаратов [1], а также в виде потенциальных агентов для лечения онкологических и вирусных заболеваний.

В настоящей работе методами рН-потенциометрического и СФ-метрического титрований изучены равновесия в растворах комплексов оксованадия(IV) с аминокислотами и ароматическими диимидами при 25°C на фоне 1 М KNO_3 . Результаты титрований обработаны по программе STALABS [2].

В дополнение к проведенным экспериментам выполнены квантово-химические расчеты, подтверждающие структуры комплексов, участвующих в равновесиях в растворах исследуемых систем. Структуры реагентов, интермедиатов и конечных продуктов реакций замещения и обмена лигандов в растворах комплексов оптимизированы по программе ORCA [3] методом DFT на уровне B3LYP/def2-TZVPP с учетом эффектов среды в модели растворителя С-PCM.

Полученные результаты позволяют прогнозировать некоторые аспекты биологической активности комплексов оксованадия(IV).

1. Carpio E.D., Hernandez L., Ciagherotti C., Coa V.V., Jimenez L., Lubes V., Lubes G., *Coord. Chem. Rev.* 2018. V. 372, P. 117-140.
2. Krutikov A.A., Shtyrlin V.G., Spiridonov A.O., Serov N.Yu., Il'yin A.N., Gilyazetdinov E.M., Bukharov M.S., *J. Phys. Conf. Ser.* 2012. V. 394. 012031, P. 1-6.
3. Neese F., *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.* 2012. V. 2, P. 73-78.

ОРГАНИЗАЦИЯ ВНЕУРОЧНОЙ РАБОТЫ ПО ХИМИИ

А.З. Фадеева

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

fanya9632@gmail.com

В работе рассматривается активное освоение внеурочной деятельности, как способ решения проблем: реализация межпредметных связей, активизация и мотивация учащихся, профориентационная деятельность, расширение кругозора.

Суть внеурочной деятельности, планирования, организации рассмотрена в работе[1] Он состоит в том, что внеклассная деятельность выступает, как отхождение от традиционных форм. Именно оно помогает углубить знания по химии, расширить спектр знаний и получению учащимися социального опыта. Организация внеурочной деятельности происходит в экстенсивной форме. Также внеурочная деятельность является полезным способом организации досуга учащихся.

Выпускная квалификационная работа посвящена проведению интенсивной формы внеурочной деятельности.

Интенсивность проведения различных кружков, экскурсий, недель и т.д. помогает реализовать самостоятельность учащихся, социальное взаимодействие, также углублению знаний, расширения спектра знаний. Для учащихся средних классов это отличный способ для формирования профильных классов по химии. Также это дает эмоциональное воздействие на учеников: развитию творческих способностей, стимулирует к самообразованию, способствует развитию изобретательности. Внеурочная деятельность дает свободу фантазий, и дается легче тем ученикам, которым дается учебная программа по химии, благодаря своей творческой направленности.

Кроме того, активная внеурочная деятельность полностью соответствует требованиям ФГОС. Данная черта требуется в современном мире. Именно через требования ФГОС к внеурочной деятельности учащиеся могут раскрыть в себе новые, доселе ему самому неизвестные, таланты и способности. Внеурочная деятельность дает учащимся определить свою индивидуальность и определить свои жизненные принципы

1. Чернобыльская Г.М. Методика обучения химии в средней школе, – М.: Гуманит. издат. Центр ВЛАДОС, 2000

ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ ИНОСТРАННЫХ СТУДЕНТОВ

С.Р. Фазылова

К(П)ФУ, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

fazilova.sumbel.exo@yandex.ru

Дисциплина «Методика преподавания химии» – одна из важнейших в профессиональной подготовке будущих учителей химии. В последнее время в обучении иностранных студентов возникли проблемы, связанные с миграционными сложностями. Это обусловило необходимость применения дистанционных технологий в обучении и выявления особенности организации занятий в режиме онлайн для успешного формирования у иностранных студентов профессиональных компетенций.

Цель исследования – выявление организационных особенностей дистанционного обучения иностранных студентов на примере адаптации практических занятий по методике преподавания химии. Исследование велось на базе Химического института имени А.М. Бутлерова Казанского федерального университета. Опытно-экспериментальная работа включала этапы – подготовительный, дидактический и заключительный. На подготовительном этапе в результате анализа различных интернет-платформ по их организационным возможностям была выбрана система Zoom. Особенности организации дистанционного обучения связаны с дидактическим этапом, который включал применение ранее разработанных и систематизированных цифровых дидактических материалов [1, 2] по методике химии (презентации, видео-опыты, технологические карты уроков, тестовый контроль знаний и умений, конспекты внеурочных мероприятий). Заключительный этап связан с анкетированием студентов на выявление эффективности обучения с применением дистанционных технологий.

1. Гильманшина С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1; URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).
2. Гильманшина С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. – С. 151-155.

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЦИКЛОПЕНТАДИЕНА С АКРИЛОНИТРИЛОМ В ПРИСУТСТВИИ ЦЕОЛИТОВ

Д.Ш. Фахретдинов, И.Ш. Якупов, Э.Р. Латыпова, Р.Ф. Талипов

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», Уфа, Россия

dfahr9@mail.ru

В ходе теоретических исследований влияния диаметра пор цеолитов на полную энергию адсорбции переходного состояния взаимодействия акрилонитрила (АН) и циклопентадиена (ЦПД) было обнаружено, что наименьшая энергия адсорбции E_{TS} , а следовательно, наибольшая энергия стабилизации переходного состояния (ПС), достигается при использовании цеолитов с диаметром пор 0,64 нм (рис 1) [1]. Следовательно, в присутствии цеолитов с данными размерами пор реакция взаимодействия АН и ЦПД будет протекать быстрее, что можно констатировать по увеличению константы скорости реакции. Однако проведенные кинетические исследования с использованием цеолитов марок NaA, KA, NaX, NaY и CaY, показали неоднозначные результаты, а именно, отсутствие корреляции между диаметром пор цеолитов и константой скорости реакции (рис 2). Полученные данные можно обосновать тем, что процесс адсорбции молекул ЦПД в порах цеолитов [2] может привести как к увеличению, так и к уменьшению скорости реакции в зависимости от насыщенности полостей цеолита молекулами ЦПД.

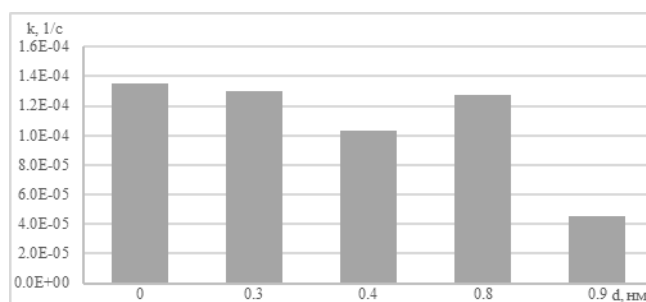


Рисунок 1 – Зависимость константы скорости реакции взаимодействия циклопентадиена и акрилонитрила от размера пор цеолита.

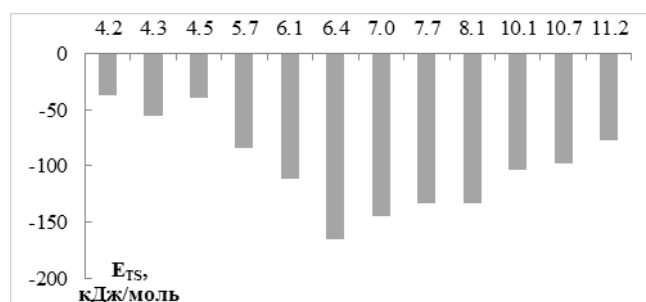


Рисунок 2 – Зависимость полной энергии адсорбции ПС взаимодействия циклопентадиена с акрилонитрилом от размера пор цеолитов.

1. И.Ш. Якупов, Р.Ф. Калимкин, Д.Ш. Фахретдинов, Э.Р. Латыпова, И.В. Вакулин, Р.Ф. Талипов // Тезисы докладов VI Всероссийской (заочной) молодежной конференции "Достижения молодых ученых: химические науки", Уфа -2021, 155 стр.
2. S. Imachi, M. Onaka // Tetrahedron Letters 45 (2004) 4943–4946.

НОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА НА ОСНОВЕ АРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ И РАЗЛИЧНОЙ ТОПОЛОГИИ И ХИНОНОПОДОБНЫХ СТРУКТУР

А.П. Федонин^a, К.А. Ившин^a, К. Е. Метлушка^b

^a Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

anton.fedonin@mail.ru

Была синтезирована и охарактеризована серия новых сокристаллов комплексов с переносом заряда на основе тетрацианохинодиметана и его фторпроизводных с полициклическими ароматическими углеводородами различной топологии и размеров. Выявлены закономерности влияния латеральных взаимодействий с участием гетероатомов, водородных связей и взаимодействий в стопке на их кристаллическую упаковку. Молекулы донора и акцептора образуют чередующиеся стопки D···A···D···A. Боковые взаимодействия в подсистеме акцептор-акцептор влияющие на кристаллическую структуру комплексов вносят значительные изменения в $\pi\cdots\pi$ взаимодействия.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

ВЛИЯНИЕ ОБЪЁМА ЗАМЕСТИТЕЛЯ МОНОЗАМЕЩЁННЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ АМИДНЫЕ И КАРБОКСИЛЬНЫЕ ГРУППЫ, НА ФОРМЕ ТВЁРДЫХ ЛИПИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Д.А. Филимонова, А.А. Назарова, Л.С. Якимова, И.И. Стойков

Химический институт им. А.М. Бутлерова, КФУ, Казань, Россия

Filimon.darya@gmail.com

Поиск новых и эффективных методов лечения заболеваний, связанных с центральной нервной системой (болезнь Альцгеймера, Паркинсона и т.д.), до сих остаётся актуальной в медицинской и научной среде. Для её решения современная медицина предлагает использовать адресную доставку лекарств. Помимо известных коллоидных систем, таких как липосомы и полимерные наночастицы, в качестве носителя лекарственного вещества всё больший интерес вызывают твёрдые липидные наночастицы (ТЛН). ТЛН увеличивают абсорбцию, повышают биодоступность, улучшают тканевое распределение в органе-мишени и обеспечивают контролируемое высвобождение лекарства, и имеют высокую стабильность. На сегодняшний день макроциклические молекулы рассматриваются как аналог классических липидов, формирующих липидную матрицу. Наша исследовательская группа впервые применила в синтезе ТЛН новый класс макроциклов, пиллар[5]арены. Перспектива варьирования заместителей различных по природе и заряду в макроциклической платформе позволяет значительно увеличить число потенциальных молекул-«гостей», а также способствует образованию различных типов супрамолекулярных ассоциатов.

В данной работе был разработан подход к синтезу монозамещённых пиллар[5]аренов, содержащих как одну, так и две карбоксильные группы. Синтезированные соединения были охарактеризованы рядом физико-химических методов анализа. Было показано образование различных типов ассоциатов (супрамолекулярные полимеры, мицеллоподобные структуры) в хлороформе, диметилсульфоксиде и системе тетрагидрофуран-вода в зависимости от заместителя в структуре монозамещённого пиллар[5]арена. Методом нанопреципитации были получены твёрдые липидные наночастицы. Было установлено, что присутствие двух карбоксильных групп в структуре заместителя приводит к формированию сферических частиц размером 364-454 нм, тогда как макроцикл с одной карбоксильной группой образует стрелковидные агрегаты с диаметром 50-80 нм и длиной 700-1000 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №20-03-00816).

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ СЕЛЕКТИВНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАТЕХОЛАМИНОВ НА ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ КОМПОЗИТАМИ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИМЕРА С ИММОБИЛИЗОВАННЫМИ ЧАСТИЦАМИ ПАЛЛАДИЯ

Д.Ю. Хайруллина, Ю.А. Лексина, И.А. Челнокова, Л.Г. Шайдарова

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

khairullinadarina@gmail.com

Катехоламины (КА) являются одновременно гормонами и медиаторами симпатoadреналовой системы, участвующими в нескольких центральных функциях, таких как память, эмоции и познание. Адреналин (АД), норадреналин (НАД), дофамин (ДА) вырабатываются в надпочечниках и некоторых областях мозга, который играет ряд важных функций в организме человека. В результате снижения уровня катехоламинов уменьшается скорость мыслительных процессов, ухудшается настроение, усиливается депрессия. В связи с этим, поиск приемов повышения чувствительности и селективности определения КА остается актуальной задачей на сегодняшний день. Сочетание методологии вольтамперометрии с каталитическими свойствами химически модифицированных электродов (ХМЭ) позволяет значительно расширить аналитические возможности метода. Среди ХМЭ интерес представляют сенсоры на основе молекулярно-импринтированных полимеров (МИП), благодаря свойству молекулярной памяти, которая имеет форму и размер отпечатков молекул темплата.

Целью данной работы возможность использования планарного электрода (ПЭ), модифицированного композитом из МИП на основе экологически чистого мономера – никотинамида, с иммобилизованными частицами палладия, для вольтамперометрического определения КА.

На вольтамперограммах окисления КА, полученных на электроде с МИП, на анодной ветви наблюдается один пик, высота которого зависит от концентрации этих соединений. На композитном ХМЭ наблюдается многократный прирост тока и уменьшение перенапряжения окисления катехоламина. Каталитический отклик полученного ХМЭ отличается высокой стабильностью и воспроизводимостью.

Рассмотрена возможность селективного определения ДА в присутствии АД или НАД на композитном электроде. Разность потенциалов составляет 200 мВ, что позволяет проводить совместное определение двух соединений по одной вольтамперограмме. При этом линейная зависимость тока пика от концентрации ДА наблюдается в интервале от 5×10^{-10} до 5×10^{-3} М. При использовании ХМЭ без обновления поверхности электродов в течение суток воспроизводимость сигнала достаточно устойчива ($Sr < 2.0 \%$).

Предложенный способ позволяет проводить селективное определение ДА в присутствии АД и НАД с высокой чувствительностью в модельной системе сыворотки крови и урины в интервале концентраций, характерных для этих биологических жидкостей.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета

ГИБРИДНОЕ ОБУЧЕНИЕ В ПРЕПОДАВАНИИ ХИМИИ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ

К.М. Хакимуллина, А.З. Гайфуллина

Химический институт им. А. М. Бутлерова К(П)ФУ, Казань, Россия

hakimullinakm@gmail.com

Сейчас онлайн-образование движется в сторону проектной работы и обучения, ориентированного на ребенка. Когда мы смотрим в будущее, становится ясно, что нам нужен системный и устойчивый подход, который справится с любыми непредвиденными обстоятельствами. И им может стать гибридное обучение. Цель гибридной модели — объединить преимущества обоих видов образования и создать максимально удобную и эффективную модель обучения. Под гибридной системой обучения мы подразумеваем решение, которое позволяет параллельно получать образование как в классе, так и в формате онлайн. У вас может быть половина класса в школе, в то время как остальные дети находятся в изоляции. Однако это не является помехой — все учатся вместе.

Важен баланс между онлайн-взаимодействием и живым общением, чтобы правильно использовать Интернет-ресурсы. Цифровые инструменты должны быть доступны всем и везде, тогда обучение будет эффективным. Также необходимо учитывать следующее, чтобы компьютерные технологии не вели к цифровому слабоумию детей, необходимо учителям ответственно подходить к этой технологии и применять правильно все инструменты. Многие учителя либо не умеют ими пользоваться, либо не желают. Обучающиеся в свою же очередь должны быть готовы работать большую часть самостоятельно.

Было исследовано применение социальных сетей, мессенджеров, возможности Интернета в обучении. Пользу данного исследования видим в повышении продуктивности цифровой деятельности, в коллаборации, в развитие креативной среды, инициативной самостоятельности. Использование ресурсов Интернета дает возможность работы с разными учителями, профессорами, с различными интересными и нужными людьми удаленно на одну и ту же тему, что ведет к коллаборации и на международном уровне. С внедрением цифровых технологий, у ребенка стало намного больше возможностей развить свои таланты и способности. А у преподавателя – сделать образовательный процесс максимально эффективным.

ТРИПТАНТРИН: СИНТЕЗ И СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ

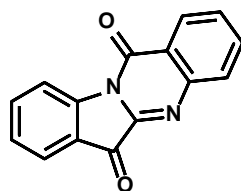
А.В. Халиков^а, А.В. Немтарев^{а,б}, С.Т. Минзанова^б, В.Ф. Миронов^{а,б}

^а Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^б Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

adelkhalikov@yahoo.com

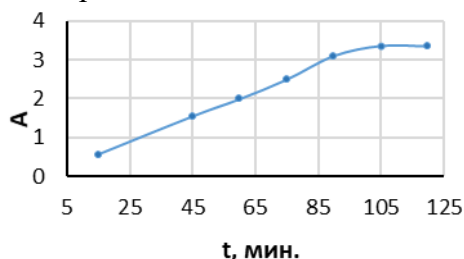
Алкалоиды являются важной в практическом отношении группой вторичных метаболитов [1]. Хиназолиновый алкалоид триптантрин, содержащийся в ряде растений и выделенный из культуры дрожжей *Candida lipolytica*, за счет простоты синтеза и наличия широкого спектра фармакологических свойств можно считать одним из перспективных в практическом отношении вторичных метаболитов.



триптантрин

В работе обсуждаются экспериментальные данные по синтезу триптантрина по реакции антраниловой кислоты с изатином в присутствии хлористого тионила.

Показано, что на скорость образования и выход триптантрина сильное влияние оказывает природа растворителя. Так, при проведении реакции в среде бензола при 120°C (в герметичном реакторе) выход триптантрина составляет 75-77%. Экспериментально определенная растворимость триптантрина в воде составляет 24 мкг/мл. В работе показано, что кислые полисахариды (на примере свекловичного пектина) способны солубилизовать триптантрин в воде, повышая его растворимость в 2 раза.



Динамика образования триптантрина в среде бензола по данным УФ-спектрофотометрии

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету на выполнение государственного задания в сфере научной деятельности.

1. Alkaloids. Chemistry, Biology, Ecology, and Applications, Elsevier Science; 2nd Ed., 2015, 496 p.

ПРИМЕНЕНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ НА УРОКАХ ХИМИИ

А.В. Хафизова

Химический институт им. А. М. Бутлерова К(П)ФУ, Казань, Россия

alsu.khafizova.02@mail.ru

В нашем мире индивиду все сильнее нужно проявлять навыки исследования. Именно из-за этого в педагогике, а также в образовательной среде растет интерес к поисковой деятельности ребенка как важнейшего образовательного ресурса. Данная ситуация повлияло на появление нового понятия – исследовательское обучение. Такого рода обучение направлено на активизацию учебного процесса, придавая ему исследовательский, познавательный аспект. Исследовательская деятельность обучающихся – это образовательная технология, использующая в качестве основного инструмента образовательное исследование [1]. Цель исследовательского обучения заключается в развитии навыков порождения информации путем анализа материала, подготовка к индивидуальной исследовательской работе. Специфику и сущность исследовательской деятельности определяют предсказание и проверка полученного знания, обозначение гипотезы, определение точных способов и средств действий, проведение химического эксперимента [2].

В ходе работы была разработана и проведена серия уроков химии с элементами исследовательской деятельности. Реализация элементов исследовательской деятельности на уроках химии способствует формированию положительной мотивации к изучению предмета и развивает их творческий потенциал. Анализ результатов дает возможность утверждать, что разработанные в рамках данного исследования комплекс уроков могут быть использованы в образовательном процессе средней общеобразовательной школы.

1. Бойчук, Т. А. Исследовательское обучение учащихся на уроках химии / Т. А. Бойчук, М. А. Шишлова // Успехи современного естествознания. – 2013. – №3. – С. 116-117.
2. Юрко, Ю. Ю. Сущность понятия «Исследовательская деятельность» в психолого-педагогической литературе / Ю. Ю. Юрко // Проблемы современного педагогического образования. – 2015. – №46-2. – С. 360-366.

ИЗУЧЕНИЕ САМОДИФФУЗИИ МОЛЕКУЛ В СИСТЕМЕ ГИАЛУРОНОВАЯ КИСЛОТА – ВОДА МЕТОДОМ ЯМР С ИМПУЛЬСНЫМ ГРАДИЕНТОМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Е.Р. Хисраваширова, Д.Л. Мельникова, В.Д. Скирда

Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Институт физики, Казань, Россия

khisravashirova@bk.ru

Без преувеличения можно сказать, что наибольший интерес, как с точки зрения практического использования, так и с точки зрения фундаментальной науки представляют гидрогели – сетчатые полимеры, набухшие в растворителе – водной среде [1]. Гидрогели в последние годы стали предметом интенсивных исследований в связи с возможностью использования их в современных областях биотехнологий, при создании эффективных влагоабсорбентов, медицинских материалов, комплексообразователей и т.п. [2]. Потенциальные возможности использования гидрогелей далеко не исчерпаны. Установление характеристик гелевой структуры имеет важное значение для понимания механизма формирования надмолекулярных образований.

Целью нашей работы стало исследование особенностей трансляционной подвижности гликозаминогликана – гиалуроновой кислоты (ГК) в водных растворах методом ^1H ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля. В результате анализа полученных диффузионных затуханий сигнала спинового эхо при различных временах диффузии t_d были установлены признаки ограниченной самодиффузии молекул ГК. Предположительно, этот экспериментальный факт свидетельствует о наличии сложной надмолекулярной организации полимерных молекул в исследуемой системе.

1. Burdick J. A., Prestwich G. D. Hyaluronic acid hydrogels for biomedical applications //Advanced materials. – 2011. – V. 23, № 12. – P. 41-56.
2. La Gatta A. et al. Hyaluronan scaffolds via diglycidyl ether crosslinking: Toward improvements in composition and performance //Carbohydrate polymers. – 2013. – V. 96, № 2. – P. 536-544.

СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ДОСТИЖЕНИЙ ОБУЧАЮЩИХСЯ НА УРОКАХ ХИМИИ

А.А. Хусаинова, А.З. Гайфуллина

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

alina05042001@icloud.com

Оценивание выполняет развивающую, образовательную, мотивационную и информационную функции [1, с. 77]. Очевидно, что система оценивания должна быть эффективной, т.е. она должна способствовать достижению планируемых образовательных результатов всеми группами обучающихся. Для этого система оценивания должна быть объективной и информативной, т.е. результаты оценивания должны давать по возможности точное и конкретное представление о достигнутых обучающимися результатах. Система должна быть прозрачной, нормы и правила оценивания определяются до начала учебного периода, а не по ходу учебного процесса. Эта система должна блокировать возможность педагогического произвола, должна быть понятной детям, соответствовать запросам родителей и реалистичной с точки зрения учителей [2, с. 27]. Существующая 5-бальная система оценивания не соответствует требованиям, которые предъявляет ФГОС. Учителя нуждаются в новых, более информативных средствах оценивания [3].

Цель исследования заключается в рассмотрении подходов к пониманию оценивания в образовательной практике при обучении химии в школе.

Технология оценивания образовательных достижений (учебных успехов) включала ряд позиций:

1. Что оцениваем? – результаты (личностные, метапредметные, предметные).
2. Кто оценивает? – учитель и ученик вместе определяют оценку и отметку.
3. Сколько ставить отметок? – по числу решенных задач.
4. Где накапливать оценки и отметки? – в таблицах образовательных результатов.
5. Когда ставить отметки? – текущие – по желанию ученика, за тематические проверочные работы – обязательно.
6. По каким критериям оценивать?
 - базовый – решение типовой задачи, качественная оценка: «хорошо», «нормально»;
 - повышенный – решение нестандартной задачи, качественная оценка: «отлично», «почти отлично»;
 - максимальный, необязательный – решение, не изучавшийся в классе задачи, качественная оценка: «превосходно».
7. Как определять итоговую оценку? – по таблицам предметных результатов и на основе всех положительных оценок, накопленных в таблицах образовательных результатов.

1. Байденко В.И. Новые методы и подходы к организации образовательного процесса. / Под ред. В.И. Байденко. – М.: 2007.
2. Криволапова Н.А. Система оценки индивидуальных достижений обучающихся: методические рекомендации для руководителей общеобразовательных организаций / авт.-сост.: Н. А. Криволапова, В. Д. Ячменев ; ГАОУ ДПО ИРОСТ. – Курган, 2018. – 60с.
3. Хусейнова А.А., Сентилрубан О.В. ОЦЕНИВАНИЕ УЧЕБНЫХ ДОСТИЖЕНИЙ: СОВРЕМЕННЫЙ ВЗГЛЯД // Современные проблемы науки и образования. – 2020. – № 4.

ПРИБОР ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЕ МАЛЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ РАСТВОРЕННОГО КИСЛОРОДА В РАЗЛИЧНЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

А.В. Чернов, Ф.А. Карамов

*Казанский национальный исследовательский технический университет имени А. Н. Туполева,
Казань, Россия*

s-4ern@yandex.ru

Определение концентрации растворенного кислорода в водных средах весьма актуальная задача в различных областях народного хозяйства. Такие измерения весьма актуальны, например, для фармакологии – измерение уровня кислорода в биореакторах, экологии – измерение уровня кислорода в сточных водах или мониторинг уровня кислорода в природных водоемах, технической – контроль уровня кислорода в технологических водах, для замедления коррозионных процессов и пр.

Существует множество способов измерения уровня растворенного кислорода, как стандартных, так и довольно специфических. Одним из распространенных методов является электрохимический, с использованием соответствующих электродов. Данный тип сенсора применен в разработанном приборе. Одним из основных его преимуществ стоит отметить – относительная простота конструкции и простота регистрации результатов измерений с использованием современной элементной базы.

Особенностью разработанного сенсора также стоит отметить, что в качестве рабочего электрода применен ансамбль - массив микроэлектродов. Данная особенность конструкции позволяет значительно улучшить характеристики датчика по сравнению с «классической» конструкцией [1].

Помимо первичного преобразователя, разработана электронная часть прибора. Сердцем электронной части является микроконтроллер с ядром RISC-V. Помимо вычислительного ядра, в состав примененного микроконтроллера входит высокоточный 24-разрядный аналого-цифровой преобразователь (АЦП). Применение современной элементной базы позволило минимизировать габариты электронной части и конструктивно разместить их в одном корпусе с измерительным сенсором. Также стоит отметить, что заложенное техническое решение позволяет еще больше увеличить чувствительность и функциональность сенсора, так как позволяет реализовать измерение методом коммутационной хронамперометрии [2].

Разработанный прибор имеет интерфейс информационного взаимодействия RS-485 с поддержкой протокола ModBUS, что позволяет напрямую подключать его к автоматизированным системам управления технологическими процессами (АСУ ТП) и объединять несколько датчиков в единую шину. Также прибор может работать автономно, записывая измерения в энергонезависимую память с заданным периодом измерения. Отметим, что прибор прошел апробацию на предприятии нефтехимической отрасли.

1. Будников Г. К. Модифицированные электроды для вольтамперометрии в химии, биологии и медицине / Г. К. Будников, Г. А. Евтюгин, В. Н. Майстренко. – 4-е изд., электрон. – М. : Лаборатория знаний, 2020. – 419 с. – ISBN 978-5-00101-723-3.

2. Пат. 2489710 Российская Федерация, МПК G 01 N 27/26 (2006.01). Способ коммутационной хроноамперометрии / Мошкин В.В.; Хустенко Л.А., заявители и патентообладатели Мошкин В.В.; Хустенко Л.А. – № 2011151238/28; заявл. 20.02.2012; опубл. 10.08.2012, Бюл. № 22. – 6 с.

АЦЕТОНИДЫ ПИРИДОКСИНА В СИНТЕЗЕ СОЛЕЙ О-МОНОТЕРПЕНИЛДИТИОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ

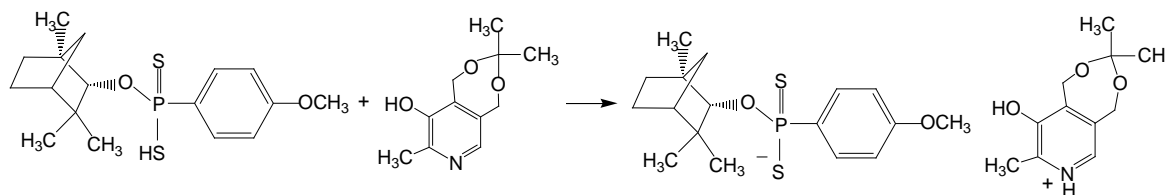
Д.А. Чудаков^а, А.А. Яковлев^а, И.С. Низамов^а, И.Д. Низамов^а,
Э.С. Батыева^б, Р.А. Черкасов^а

^а Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^б Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
«Казанский научный центр» РАН, Казань, Россия

danya.chudakov.2001@mail.ru

Пиридоксин как разновидность витамина В₆ участвует в синтезе белков, ферментов, гемоглобина и серотонина. Пиридоксин может образовывать солевые структуры в реакциях с сильными органическими кислотами, в качестве которых мы использовали арилдитиофосфоновые кислоты, полученные в реакциях 2,4-диарил-1,3,2,4-дитиадифосфетан-2,4-дисульфидов с монотерпеновыми спиртами. В реакции солеобразования с дитиофосфоновыми кислотами мы ввели пиридоксин в модифицированной форме, используя ацетонную защиту двух гидроксильных групп. Найдено, что семичленный циклический ацетонид реагирует с арилдитиофосфоновыми кислотами на основе (*1R*)-эндо-(+)-фенхилового спирта и (*1S*)-эндо-(–)-борнеола в смеси бензол-этанол (1:1) при 50 °С и течение 2.5 ч образует циклические пиридоксиний арилдитиофосфонаты.



Полученные соли обладают антикробной активностью по отношению к *Bacillus cereus*, *Staphylococcus aureus* и *Candida albicans*.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА НОВЫХ АЗО-ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ГИПОКСИИ

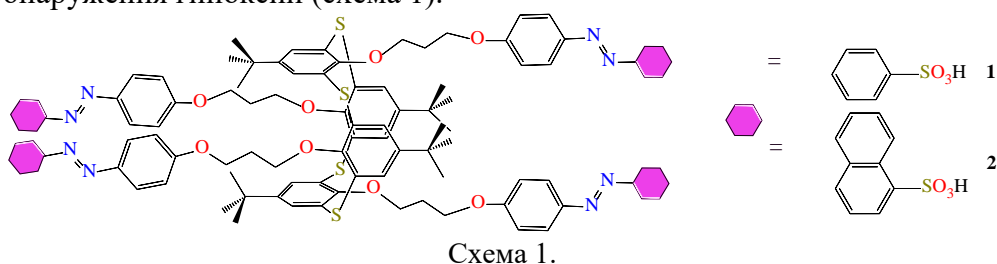
Е.С. Чурбанова^а, Ф.Б. Галиева^б, М.А.М. Халифа^а, С.Р. Клешина^б, Д.А. Миронова^а, В.А. Бурилов^а, С.Е. Соловьева^{а,б}, И.С. Антипин^{а,б}

^а Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^б Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

alyaska169@gmail.com

Гипоксия – это патологический процесс, возникающий при нарушении поступления кислорода извне, доставки кислорода к тканям и органам и, наоборот, утилизации его тканями и органами. Необходимо и важно вовремя определить наличие гипоксии, потому что она также является важной характеристикой проявления и распространения опухоли. По этой причине, важной задачей исследователей является создание супрамолекулярных комплексов с сигнальной системой для обнаружения гипоксии. Использование каликсаренов в качестве синтетической платформы представляется перспективным подходом, что было показано на примере азо-производных каликс[4]аренов в конформации *конус*, на основе которых были получены комплексы с родаминовыми красителями [1]. В связи с этим, целью данной работы является синтез азо-производных тиакаликс[4]арена **1,2** в конформации *1,3-альтернат* для дальнейшего комплексообразования с красителями катионного типа и создание сигнальных систем на их основе для обнаружения гипоксии (схема 1).



В работе приведен синтез азо-производных тиакаликс[4]арена **1,2** в конформации *1,3-альтернат*, функционализированных сульфогруппами по нижнему ободу (схема 1). Для установления структуры продуктов использовались следующие методы: ИК-спектроскопия в твердой фазе, MALDI TOF масс-спектрометрия, ¹H и ¹³C ЯМР-спектроскопия в растворе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-00138.

1. Mironova D., Burilov V., Galieva F., Khalifa M.A.M., Kleshnina S., Gazalieva A., Nugmanov R., Solovieva S., Antipin I. *Molecules*, **2021**, *26*, 5451.

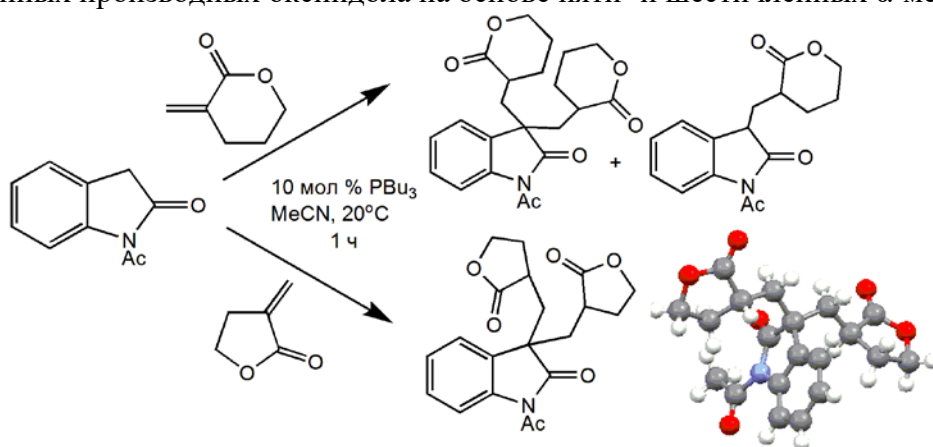
ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ ОКСИНДОЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ α -МЕТИЛЕНЛАКТОНОВ

А.А. Шабанов, А.В. Салин

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

grindaman@mail.ru

Производные оксиндола привлекают большое внимание, поскольку данный фрагмент присутствует в структуре многих природных и синтетических соединений, обладающих биологически активными свойствами [1,2]. Особый интерес представляют конформационно жесткие 3,3-дизамещенные производные с четвертичным атомом углерода, который присутствует в оксиндольных алкалоидах: хорсфиллине, элакомине, стрихнофиллине. В настоящей работе с использованием органокатализа третичными фосфинами впервые осуществлен синтез 3,3-дизамещенных производных оксиндола на основе пяти- и шестичленных α -метиленлактонов.



Реакции тулипалина А и арглабина с N-ацетилоксиндолом дают исключительно продукты двойного присоединения по Михаэлю. Реакция с участием арглабина протекает диастереоселективно без эпитимеризации возникающих стереоцентров, принимающих S-конфигурацию. В реакции с α -метилен- δ -валеролактоном получена смесь продуктов моно- и бис-присоединения. Продукты очищены колоночной хроматографией и идентифицированы с помощью ЯМР-, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии высокого разрешения и РСА.

1. C.V. Galliford, K.A. Scheidt. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2007, **46**, 8748-8758.
2. B.M. Trost, M.K. Brennan. *Synthesis*, 2009, **2009**, 3003-3025.

О СТРУКТУРНО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ РАСТВОРОВ СМЕСЕЙ НАТРИЕВЫХ СОЛЕЙ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

З.Д. Гареева, А.Ф. Шаймухаметова

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», Уфа, Россия

zarinagare@yandex.ru, adel.shaim@gmail.com

Перспективной основой для создания ранезащитных полимерных плёночных покрытий являются полисахариды, например, водорастворимое производное хитозана – натриевая соль N-сукцинилхитозана (СХТЗ) или натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ), которые отвечают практически всем требованиям, предъявляемым к защитным материалам. При этом одно из главных их достоинств – способность к биоразложению под действием ферментов, выделяемых раневой поверхностью, что делает возможным создание таких плёночных покрытий, которые могли бы накладываться на рану однократно, и постепенно разлагались на ране по мере роста новой ткани. Проведена экспериментальная оценка структурообразования в растворах смесей СХТЗ и КМЦ для возможности регулирования степени ферментативного разложения материалов на их основе. В бинарных полимерных смесях велика вероятность образования надмолекулярных структур, представляющих собой гомоагрегаты обоих полимеров, для которых характерна повышенная плотность упаковки и замедленная скорость биохимических превращений. Смешение СХТЗ и КМЦ в растворе приводит к однозначному усилению агрегационных процессов, при этом тип образуемых агрегатов (гомо- или гетеро-) определяется концентрацией полимеров в исходном растворе. В случае разбавленных растворов (с концентрацией вблизи концентрации формирования сетки зацеплений), то в смеси формируются гомоагрегаты, если более концентрированные – то гетероагрегаты (рис. 1).

Рисунок 1 – Зависимость динамической вязкости, определенной при частоте осцилляции 0,1 Герц, от соотношения полимеров в смеси для растворов СХТЗ-КМЦ с концентрацией 0,5 г/дл-0,3 г/дл (1), 0,5 г/дл-0,5 г/дл (2), 1,0 г/дл-1,0 г/дл (3), 3,0 г/дл-1,0 г/дл (4), 5,0 г/дл-1,0 г/дл (5). Размерность исходной η – в Па*с.

Таким образом, проведенные исследования показывают, что, при получении полимерных пленок методом полива из растворов смесей полимеров, варьируя концентрацию и соотношение полимеров в исходных растворах, можно управлять свойствами получаемых композитов.

КОМПОЗИТЫ ОКСИДА ГРАФЕНА И НАНООКСИДОВ ЖЕЛЕЗА КАК ПРЕКУРСОРЫ СОЗДАНИЯ ГРАДИЕНТНЫХ ЭПОКСИДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Ю.Р. Шайимова, А.Н. Солодов, Д.А. Балькаев, Р.Р. Амиров

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

julia_shayimova@mail.ru

Известные подходы к созданию градиента наполнителей в полимерной матрице основаны на использовании центробежных сил, гравитации, ограниченной совместимости компонентов и магнитного поля. Преимущества последнего подхода заключаются, например, в том, что снимаются ограничения по форме изделия (по сравнению с центробежным градиентом) или направленности создания градиента (относительно силы тяжести), или упрощается состав полимерной матрицы (не надо использовать смеси ограниченно-совместимых компонентов). Для получения градиента распределения функциональных добавок в полимере предлагается использовать композиты оксида графена (ОГ) и нековалентно связанных с ним наночастиц оксидов железа (НЧОЖ). Такой композит обладает способностью ориентироваться во внешнем магнитном поле и двигаться в нем, изменяя распределение в объеме полимерного образца.

На основе полученного магниточувствительного композита ОГ/НЧОЖ с использованием эпоксидиановой смолы ЭД-20 и активного разбавителя УП-624 были изготовлены образцы эпоксидных нанокомпозитов с различными ориентациями листов ОГ в материале. Для сравнения использовали образцы эпоксидного полимера без добавок, а также содержащих отдельно ОГ и НЧОЖ. На первом этапе были проведены эксперименты по определению физико-механических характеристик (модуля Юнга, предела прочности на растяжение, относительное удлинение при разрыве) изготовленных образцов нанокомпозитов. На основе проведенных испытаний сделаны выводы о влиянии той или иной нанодобавки, а также ориентации магнитного поля при отверждении образца на указанные характеристики.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 22-23-00348).

ФОСФОРИЛИРОВАННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ β -ИОНОНА

М.Э. Шемахина^{a,b}, У.П. Урубкова^a, А.В. Немтарев^{a,b}, В.Ф. Миронов^{a,b}

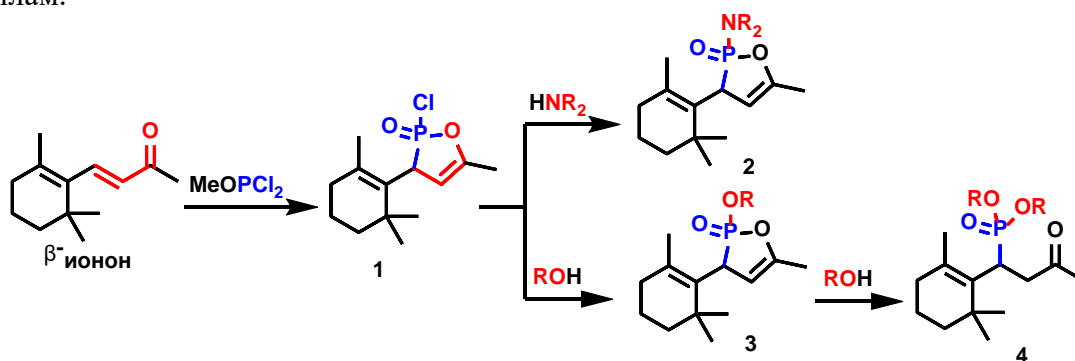
^a Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^b Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

masha-shem@mail.ru

Фосфорсодержащие гетероциклические соединения представляют большой интерес как ценные органокатализаторы в окислительно-восстановительных превращениях [1], лиганды для металлокомплексного катализа [2], известны также биологически активные пятичленные Р-гетероциклические производные [3]. Природные терпеноиды, благодаря структурному многообразию и широкой распространенности, являются ценными прекурсорами для синтеза фосфорсодержащих гетероциклов.

В работе рассматривается синтез 2-хлороксафосфолена (1), полученного взаимодействием β -ионона с метилдихлорфосфитом, и его реакционная способность по отношению к О, N-нуклеофилам.



Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства КФУ («Приоритет-2030»).

1. J. Schoene, H.B. Abed, P. Schmieder, M. Christmann, M. Nazaré // Chem. Eur. J. 2018. V.24. I. 36. P. 9090.
2. G. Li, X. Wang, Y. Zhang, Z. Tan, P. DeCroos, J.C. Lorenz, X. Wei, N. Grinberg, N.K. Yee, C.H. Senanayake // J. Org. Chem. 2017. V. 87. I. 10. P. 5456.
3. S. Nakamura, M. Yamashita, D. Yokota, I. Hirano, T. Ono, M. Fujie, K. Shibata, T. Niimi, T. Suyama, K. Maddali, K. Asai, J. Yamashita, Y. Iguchi, K. Ohnishi // Invest. New Drugs. 2010. V. 28. I. 4. P. 381
4. А.В. Немтарев, М.Э. Шемахина, В.Ф. Миронов // Журнал общей химии. 2017. Т. 87. С. 691.

СИНТЕЗ 5'-ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3-ТРИАЗОЛИЛУРИДИНА

А.В. Шепелина^a, Д.А. Татарин^{a,b}, И.Ю. Стробыкина^b, О.В. Андреева^b, М.Г. Беленок^b,
Б.Ф. Гарифуллин^b, В.Е. Катаев^b

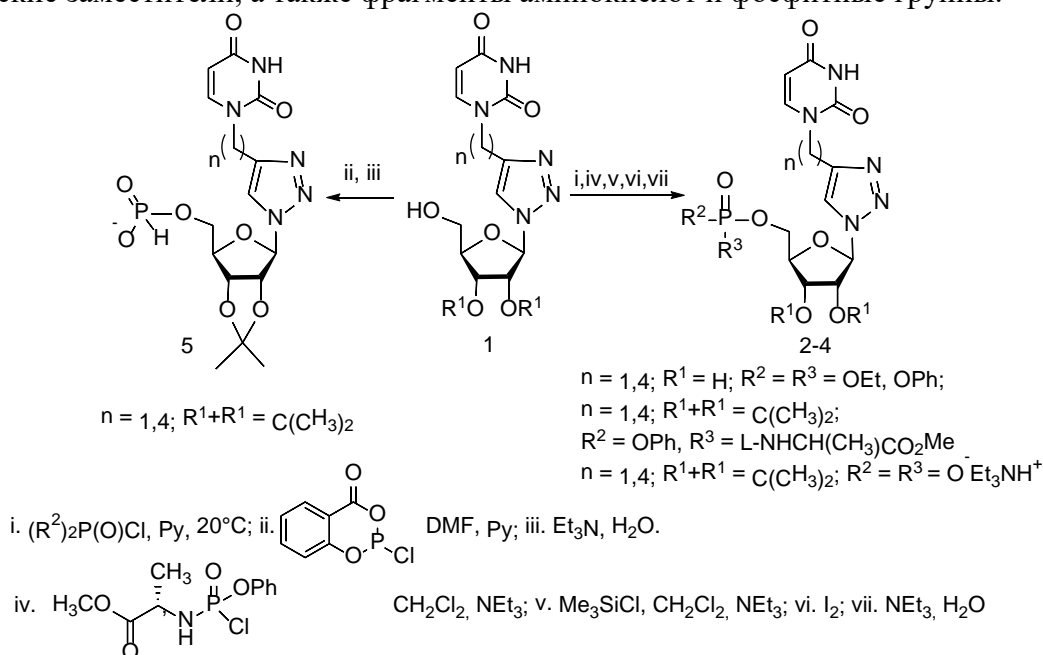
^a Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

anya.s00@mail.ru

Нуклеотиды являются важными биомолекулами и играют ключевую роль в жизни клетки. [1] Модифицированные синтетические нуклеотиды нашли широкое применение в качестве противовирусных лекарственных препаратов. [1]

В данной работе представлен синтез новых 5'-фосфорилированных производных 1,2,3-триазолилуридина с метиленовым и бутиленовым спейсерами между урацильным и 1,2,3-триазолилрибофуранозильным фрагментами, содержащих при атоме фосфора алкильные и ароматические заместители, а также фрагменты аминокислот и фосфитные группы.



Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение № 075-15-2020-777).

1. Pastuch-Gawolek, G.; Gillner, D.; Krol, E.; Walczak, K.; Wandzik, I. Selected nucleos(t)ide-based prescribed drugs and their multi-target activity. Eur. J. Pharm. 2019, 865, 172747

РЕАЛИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКОЙ НАПРАВЛЕННОСТИ ОБУЧЕНИЯ

Н.А. Шитвенкина, И.Д. Низамов

Химический институт им. А.М. Бутлерова К(П)ФУ, Казань, Россия

shitvenkina@mail.ru, nizam-ilnar@yandex.ru

В современном мире образование имеет очень большую роль и способы преподавания, а также предоставление учащимся информации и демонстрация приоритета практических знаний – первостепенная задача каждого учителя на современном этапе развития общества. Следовательно, одной из актуальных проблем в школьном образовании является представление практической направленности химии как концепции, которая подразумевает владение навыками и умениями в повседневной жизни [1]. Поэтому целью исследования была разработка модели реализации практической направленности обучения химии на ситуационных задачах из повседневной жизни. Исследование проводилось на базе МАОУ «СОШ №39 с углубленным изучением английского языка» г. Казани, в котором участвовали обучающиеся восьмых классов в количестве 46 человек.

Экспериментальная часть состоит из трех этапов: на первом этапе на основе наблюдения за деятельностью обучающихся и учителя были выявлены слабые места, на основе которых были подобраны технологии и методики для эффективного обучения; второй этап включает в себя разработку и апробацию практико-ориентированных и ситуационных задач; третий этап заключается в диагностике результатов двух групп, контрольной и экспериментальной, а также были подобраны рекомендации для последующего обучения. По результатам контрольной работы знания обучающихся экспериментальной группы улучшились в среднем на 7% по сравнению с входным контролем, во время которого уровень знаний обучающихся обеих групп был примерно одинаков.

Таким образом, полученные экспериментальным путем данные позволяют сказать, что практическая направленность обучения положительно влияет на уровень знаний, а также на успеваемость учащихся.

1. Пак М. С. Теория и методика обучения химии: Учебник для вузов. – 4-е изд. стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2021. – 368 с.

ПОЛУЧЕНИЕ АУКСЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ 3Д ПЕЧАТИ

Д.А. Шишкина, К.С. Зимин, Л.М. Амирова

Институт авиации, наземного транспорта и энергетики КНИТУ-КАИ, Казань, Россия

darya.desh01@mail.ru

Ауксетические материалы (метаматериалы) имеют сложные, заранее рассчитанные геометрические формы и отрицательные значения коэффициента Пуансона. Они демонстрируют ряд особых характеристик, таких как отличная стойкость к сжатию за счет равномерного распределения нагрузки, высокая жесткость при сдвиге и, помимо механических свойств, они способны поглощать акустическую, тепловую энергию и радиоволны за счет заложенного распределения свойств материалов в заданной структуре [1]. Но сложная структура таких материалов создает большие проблемы при их изготовлении. Метод послойного наплавления (FDM) 3Д печати дает широкие возможности для производства сложных интегральных конструкций, что дает возможность производить и ауксетические материалы.

Цель этой работы состоит в разработке 3Д модели ряда реентерабельных структур, являющихся разновидностью ауксетических материалов и наиболее интересных с точки зрения удобства производства [2], и их 3Д печать из подобранных по требуемым характеристикам полимерных материалов. В работе также были смоделированы процессы деформации разработанных структур, проведены механические испытания изготовленных пластин и показана хорошая сходимость модели и результатов испытаний. Разработанные структуры могут быть использованы в качестве заполнителей в легких конструкционных панелях с высокими ударными, вибро- и звукопоглощающими свойствами. Кроме того, по сравнению с обычными сотовыми заполнителями, реентерабельные структуры наиболее удобны для элементов, к которым предъявляются высокие требования к весу и ударной стойкости конструкции.

1. Zhang J. Large deformation and energy absorption of additively manufactured auxetic materials and structures: A review / J. Zhang, G. Lu, Z. You // Composites Part B: Engineering. – 2020. – Т. 201. – С. 108340.
2. Cheng X. Design and mechanical characteristics of auxetic metamaterial with tunable stiffness / X. Cheng, Y. Zhang, X. Ren, D. Han, W. Jiang, X. G. Zhang, H. C. Luo, Y. M. Xie // International Journal of Mechanical Sciences. – 2022. – Т. 223. – С. 107286.

ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ШКОЛЬНОМ ХИМИЧЕСКОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

А.В. Шорсткина, Г.Ф. Мельникова

*Казанский Федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

anna07072003@mail.ru

Актуальность нашего исследования обусловлена тем, что в настоящее время доступно множество образовательных ресурсов, которые помогают учителям расширить образовательный процесс и сделать его более безопасным и интересным. Поэтому, все чаще используются цифровые образовательные ресурсы в образовании и в самом химическом эксперименте, как на самих уроках в школе, так и в дистанционных форматах образования. Основные цели использования таких цифровых образовательных ресурсов: расширение возможностей информации, которую предоставляет учитель на своих уроках; заинтересованность школьников к цифровым технологиям на уроках; экономия учебного времени, на примере химических реакций, которые проходят медленно; возможность проведения химических экспериментов для детей с ограниченными возможностями здоровья, что продвигает учебный процесс на несколько шагов вперед для таких учеников. Нами были проанализированы существующие образовательные ресурсы, доступные и удобные на наш взгляд для использования. Такие как: Chemagic^[4] данная образовательная площадка позволит ученикам создать виртуальную молекулу, а также показать несколько химических опытов, которые вряд ли будут проводиться в школе из расчета техники безопасности, также будут созданы межпредметные связи с английским языком и информатикой. ChemCollective^[3] - это не только набор виртуальных лабораторий, сценариев, учебных пособий, онлайн-курсов и тестов, но и интересная игра в которой понадобится использовать вычисление молярной массы, научный метод и базовые знания о химических реакциях, чтобы разгадать тайну детектива. Данный игровой метод является достаточно необычным в использовании цифровой игровой технологии и подойдет, как школьникам, так и студентам. Одним из современных ресурсов является Compoundchem.com^[5]- проект, где в графической форме освещают новости из мира химии или разбирают всем известные предметы на химические реакции.

В ходе работы нами выявлены как достоинства, как и недостатки виртуальных химических лабораторий. Тем не менее, мы можем сделать вывод, что цифровизация только усовершенствует преподнесение химического учебного опыта и расширяет границы для методической работы учителей.

1. Пустовит С.О. «Использование информационных технологий при проведении химического эксперимента со школьниками, обучаемыми на дому» [Электронный ресурс]. - 2018. - Текст: электронный. – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/ispolzovanie-informatsionnyh-tehnologiy-pri-provedenii-himicheskogo-eksperimenta-so-shkolnikami-obuchaemymi-na-domu> (дата обращения 04.11.2022)
2. Сабиров Д.Ш «Цифровая химия - новое направление современной химии» [Электронный ресурс]. - 2019. - Текст : электронный. – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/tsifrovaya-himiya-novoe-napravlenie-sovremennoy-matematicheskoy-himii> (дата обращения 04.11.2022)
3. Химическая коллекция. [Электронный ресурс]. - 2019. - Текст: электронный. – URL: <https://chemcollective.org/mr/index.php> (дата обращения 05.11.2022)
4. Образовательная площадка Chemagic [Электронный ресурс]. - 2020. - Текст: электронный. - URL: <https://chemagic.org/home/Index.html> (дата обращения 05.11.2022)
5. Образовательный ресурс Compoundchem.com [Электронный ресурс]. - 2022. - Текст: электронный. – URL: <https://www.compoundchem.com/about/> (дата обращения 08.11.2022)

ЭФФЕКТ СИНЕРГИЗМА ДЛЯ ИНГИБИРУЮЩЕЙ КОМПОЗИЦИИ «АГИДОЛ-2 + ФОСФИТ-168»

А.Е. Шумакова, Г.Г. Гарифуллина, Р.Н. Насретдинова

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Garifa@inbox.ru

Ингибиторы окисления (антиоксиданты) широко используются для стабилизации пластмасс и синтетических волокон, каучуков и смазочных материалов, углеводородного топлива, растворителей, полупродуктов органического синтеза и пищевых продуктов. Агидол-2 (метилен-бис(4-метил-6-третбутилфенол))- антиоксидант-стабилизатор широкого спектра действия. Используется для стабилизации резин, каучуков, нефтепродуктов, пластмасс, волокон, в лакокрасочной промышленности. Фосфит-168 - (трис-(2,4-ди-tert-бутилфенил)- фосфит) это стабильный фосфит, который реагирует с гидроперекисями, образуя нерадикальные продукты, что снижает скорость стадии вырожденного разветвления цепей.

В практике торможения окислительных процессов большое значение имеет явление синергизма. Эффект синергизма состоит во взаимном усилении эффективности действия антиоксидантов в их смеси. Таким образом, практический интерес представляет выявление наличия эффекта синергизма для ингибирующей композиции «Агидол-2 + фосфит-168».

В качестве модельного субстрата окисления выбрали этилбензол. Окисление этилбензола проводили при температуре 75°C в присутствии азодиизобутиронитрила - инициатора окисления. В качестве измерительного инструмента использовали универсальную манометрическую дифференциальную установку. В отсутствие ингибирующих добавок кинетическая кривая поглощения кислорода этилбензола имеет линейный вид, т.е. порядок реакции по кислороду нулевой, скорость реакции не зависит от концентрации кислорода, следовательно, реакция протекает в кинетическом режиме, цепи окисления ведут пероксильные радикалы этилбензола.

Исследовали влияние агидола-2 и фосфита-168 на инициированное окисление этилбензола. Получили зависимость скорости окисления этилбензола от концентрации как для агидола-2, так и для фосфита-168, что позволила вычислить константу скорости реакции пероксильного радикала этилбензола с молекулой ингибитора. Для агидола-2: $k_7 = 4,9 \cdot 10^4$ л/моль*с, для фосфита-168: $k_7 = 1,1 \cdot 10^3$ л/моль*с.

Следующим этапом работы было исследование совместного влияния ингибиторов на окисление этилбензола. В данной серии опытов суммарная концентрация добавленных двух ингибиторов остается постоянной. Установлено, что скорость окисления этилбензола в зависимости от массовой доли агидола-2 в ингибирующей композиции снижается и достигает минимального значения для массовой доли агидола-2, равной 67% . Таким образом, для изученной ингибирующей композиции «агидол-2 + фосфит-168» наблюдается эффект синергизма. Скорость окисления этилбензола ингибирующей композицией «Агидол-2 + фосфит-168» снижается в 14 раз. Агидол-2 является акцептором пероксильных радикалов этилбензола, фосфит-168 гетеролитически разрушает первичный молекулярный продукт окисления - гидроперекись – без образования радикальных фрагментов. Таким образом, за счет наличия эффекта синергизма массы добавок ингибиторов можно снизить в 14 раз.

СИНТЕЗ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ЛИГАНДОВ С ИМИНОФЕНОЛЬНЫМИ КООРДИНИРУЮЩИМИ ФРАГМЕНТАМИ НА ОСНОВЕ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ

Ю.В. Стрельникова^{a,b}, И.Д. ШУТИЛОВ^b, В.А. Васильев^b, А.С. Агарков^{a,b},
М.В. Князева^a, А.С. Овсянников^a, Д.Р. Исламов^a, А.Т. Губайдуллин^a, И.А. Литвинов^a,
С.Е. Соловьева^{a,b}, И.С. Антипин^{a,b}

^a Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

^b Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

iliyashutilov308@gmail.com

Актуальной задачей современной химии является разработка супрамолекулярных систем, обладающих различными функциональными свойствами. Удобным строительным блоком для выполнения поставленных целей является каликс[4]арен, благодаря возможности введения различных по природе координационных центров за счет функционализации нижнего и/или верхнего обода [1]. Макроциклические основания Шиффа могут избирательно хелатировать определенные ионы металлов в зависимости от количества, типа и положения донорных атомов в их структуре и природы металлических центров [2].

В настоящей работе представлен синтез серии новых, а также ранее известных макроциклических лигандов на основе дизамещённых иминопроизводных *трет*-бутилкаликс[4]арена и их комплексов с катионами Со (III).

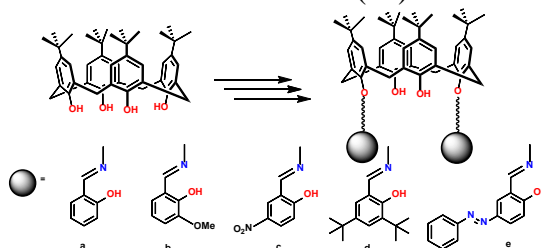


Рисунок 1 – Макроциклические основания Шиффа на основе дизамещённых производных (тиа)каликс[4]аренов с иминофенольными координирующими центрами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-10139.

1. A. Ovsyannikov, S. Solovieva, I. Antipin, S. Ferlay. *Coord. Chem. Rev.* **2017**, 352, 151–186.
2. Chaabane L., Chahdoura H., Moslah W., Snoussi M., Beyou E., Lahcini M., Srairi-Abid N., Baouab M. H. V. *Appl. Organomet. Chem.* **2019**. 33(5), 4860.

ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННЫХ ФЕНОЛЬНЫХ КИСЛОТ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЛАВАНОНОВ

Э.Н. Якупова^{а,б}, Г.К. Зиятдинова^а

^а Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^б Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности, Казань, Россия

elviraekupova96@mail.ru

В современной аналитической химии активно развиваются электрохимические сенсоры на основе химически модифицированных электродов для определения органических биологически активных соединений. Среди модификаторов хорошо зарекомендовали себя сочетания углеродных наноматериалов и полимерных покрытий различной природы. Для получения последних удобно использовать электрополимеризацию. Среди мономеров представляют интерес природные фенольные антиоксиданты, в частности фенольные кислоты. Такие электроды дают чувствительный отклик на природные фенольные антиоксиданты.

Разработаны новые электроды на основе многостенных углеродных нанотрубок и электрополимеризованных эллаговой и феруловой кислот для определения флаванонов – природных фенольных антиоксидантов цитрусовых фруктов. В качестве аналитов выбраны нарингин и гесперидин. Проведена оптимизация условий электрополимеризации по отклику целевых аналитов. Данные сканирующей электронной микроскопии, вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса подтверждают эффективность предложенных покрытий как модификаторов электродной поверхности.

Созданные электроды-сенсоры дают чувствительный отклик на нарингина и гесперидин в режиме дифференциально-импульсной вольтамперометрии. Диапазоны определяемых содержаний нарингина составляют 0.05-1.0 и 1.0-100 мкМ, а гесперидина 0.025-1.0 и 1.0-10 мкМ. Пределы обнаружения составляют 14 и 7.0 нМ соответственно. Эти характеристики превосходят все описанные ранее для электрохимических подходов. Другое преимущество сенсоров – высокая селективность отклика в присутствии структурно родственных фенольных соединений. Практическая применимость сенсоров показана на цитрусовых соках.

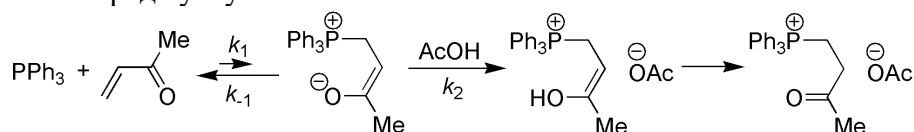
КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ РЕАКЦИИ ТРИФЕНИЛФОСФИНА С МЕТИЛВИНИЛКЕТОНОМ

А.Р. Салахетдинова, А.В. Салин

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

salakhetdinova0100@mail.ru

Метилвинилкетон (МВК) является высокоактивным акцептором Михаэля в фосфин-катализируемых реакциях [1]. Для количественной оценки реакционной способности МВК в реакции с третичными фосфинами методом остановленной струи изучена кинетика его реакции с трифенилфосфином в среде уксусной кислоты:



Ранее было показано, что для реакций третичных фосфинов с активированными алкенами характерен общий кислотный катализ, и скорость присоединения зависит от природы кислоты и ее концентрации [2]:

$$\text{Скорость} = \frac{k_1}{k_{-1}} k_2 [\text{PPh}_3][\text{алкен}][\text{AcOH}] = k_{\text{III}} [\text{PPh}_3][\text{алкен}][\text{AcOH}]$$

Экспериментально найденное значение константы скорости третьего порядка k_{III} , не зависящее от концентрации уксусной кислоты, для реакции трифенилфосфина с метилвинилкетон составляет $0.454 \pm 0.007 \text{ M}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, что значительно превосходит аналогичные значения для других ранее использованных активированных алкенов. Рассчитаны активационные параметры реакции: $\Delta H^\ddagger = 27 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$; $\Delta S^\ddagger = -163 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. На количественном уровне с использованием уравнения Майера проанализировано влияние электроноакцепторной группы на реакционную способность алкена. Установлено, что электрофильность кратной связи не является основным фактором, определяющим реакционную способность. Высокая скорость реакции связана со способностью кетонной группы эффективно участвовать в стабилизации фосфониевого енолята посредством электростатического $\text{P}^+ \cdots \text{O}^\delta-$ взаимодействия.

1. H. Guo, Y. C. Fan, Z. Sun, Y. Wu, O. Kwon. *Chem. Rev.* 2018, **118**, 10049-10293.
2. A.V.Salin, D.R. Khisamova. *J. Mol. Liq.*, 2020, **318**, 113911.

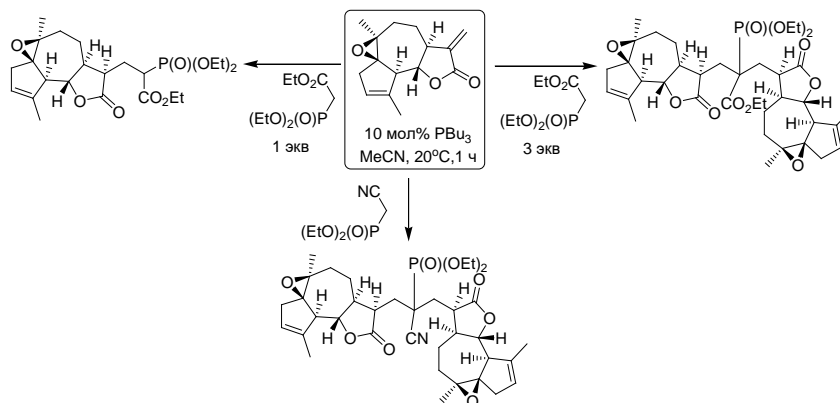
ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ПРИСОЕДИНЕНИЕ ФОСФОНАТОВ К АРГЛАБИНУ

Г.Л.К. Берналь, А.В. Салин

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

bernalg.laura@gmail.com

Модификация природных биологически активных соединений является перспективным подходом к созданию новых лекарственных препаратов. Арглабин – сесквитерпеновый гвайанолидный лактон, выделяемый из *Artemisia Glabella*, – используется в медицине в качестве противоопухолевого средства для лечения рака легкого, печени, кишечника, молочной железы и желудка [1]. С целью получения новых производных арглабина, обладающих селективным действием в отношении раковых клеточных культур и низкой токсичностью по отношению к нормальным клеткам в условиях органокатализа трибутилфосфином нами была проведена модификация данного лактона с помощью фосфонатов, содержащих активную метиленовую группу:



В реакции с триэтилфосфоацетатом ($\text{p}K_a=18.6$, ДМСО) в зависимости от молярного соотношения реагентов можно наблюдать селективное образование аддукта как моно-, так и бис-присоединения. В аналогичной реакции с диэтилцианометилфосфонатом ($\text{p}K_a=16.4$, ДМСО) всегда образуется только аддукт двойного присоединения, что обусловлено большей кислотностью метиленовых протонов в этом фосфонате. Строение продуктов доказано методами одно- и двумерной спектроскопии ЯМР, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии высокого разрешения.

1. S.H. Lone, K.A. Bhat, M.A. Khuroo, *Chem.-Biol. Interact.* 2015, **240**, 180-198.

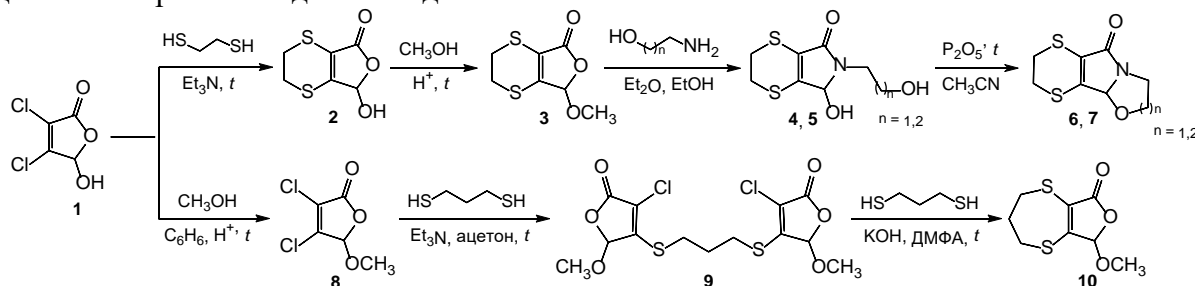
НОВЫЕ КОНДЕНСИРОВАННЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ 2(5H)-ФУРАНОНА, ДИТИОЛОВ И АМИНОСПИРТОВ

Д.С. Сульдина, Р.Г. Фаизова, О.А. Лодочникова, Л.З. Латыпова, А.Р. Курбангалиева

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

suldina.ru@gmail.com

Продолжая исследования в области синтеза серосодержащих производных 3-пирролин-2-она, в данной работе нами изучены реакции бициклического соединения **3** с 2-аминоэтанолом и 3-аминопропанолом-1. Исходный бицикл **3** получали в две стадии из мукохлорной кислоты **1** и этандитиола [1]. Реакции аминирования гетероцикла **3** проводили в среде диэтилового эфира и этанола при комнатной температуре, в результате были выделены новые гетероциклы **4** и **5**, содержащие фрагменты 1,4-дитиана и ненасыщенного γ -лактама. С целью получения трициклических систем **6** и **7** нами проведены реакции внутримолекулярной дегидратации соединений **4** и **5** в ацетонитриле в присутствии P_2O_5 . Отметим, что циклизация гетероцикла **4** с фрагментом аминоэтанола протекала существенно труднее, что сказалось на продолжительности реакции и конверсии исходного соединения.



В отличие от гетероцикла **3** на основе 1,4-дитиана, синтез конденсированного бицикла **10**, несущего дитиопиновый фрагмент, включает стадию получения бис-тиоэфира **9** из 5-метокси-2(5H)-фуранона **8** и 1,3-пропандитиола, затем следует взаимодействие бис-тиоэфира **9** с тем же дитиолом в присутствии гидроксида калия. Строение всех новых синтезированных гетероциклов охарактеризовано методами спектроскопии ИК, ЯМР 1H , $^{13}C\{^1H\}$, в ряде случаев методом рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена за счёт средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № 0671-2020-0063.

1. A.R. Kurbangaliev, O. A. Lodochnikova, N.F. Devyatova, E.A. Berdnikov, O.I. Gnezdilov, I.A. Litvinov, G.A. Chmutova. *Tetrahedron*, 2010, **66**, 52, 9945–9953.

ГИБРИДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ КАЛИКСАРЕНА, ОКСИДА ТИТАНА И НАНОЧАСТИЦ ПАЛЛАДИЯ В ФОТО-ИНДУЦИРУЕМОЙ РЕАКЦИИ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ

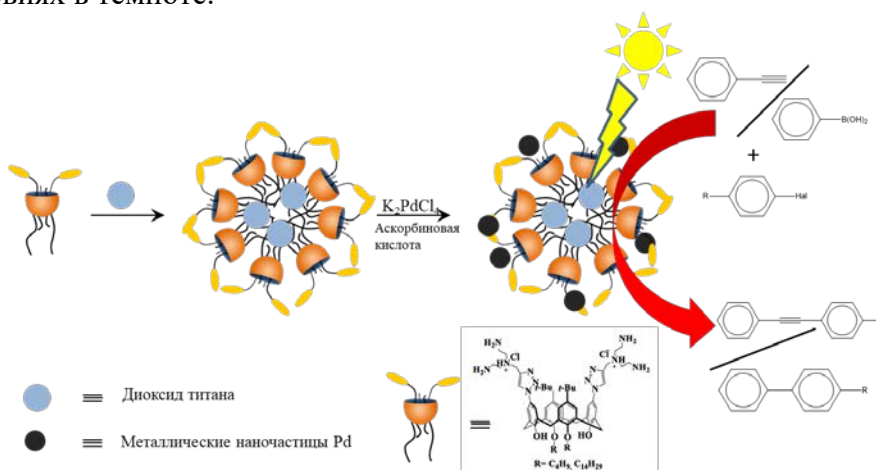
А.А. Федосеева^a, Э.Д. Султанова^a, В.А. Бурилов^a, С.Е. Соловьева^{a, b}, И.С. Антипин^{a, b}

^aХимический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань

^bИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань

elsultanova123@gmail.com

Впервые получены гибридные композиты на основе amino-содержащих каликсаренов, оксида титана и наночастиц палладия для применения в радикальной реакции кросс-сочетания фото-индуцируемой светом. Показано что использование света приводит к увеличению конверсии арилгалогенидов в реакциях кросс-сочетания Сузуки и Соногаширы, реакции проводили в водной среде в присутствии карбоната калия при облучении белым светом и в аналогичных условиях в темноте.



Таким образом, гибридные композиты могут быть использованы в качестве катализаторов в реакциях кросс-сочетания в мягких условиях, увеличение эффективности которых происходит под действие света.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для молодых ученых - кандидатов наук МК-1888.2021.1.3.

СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ АРЕНОВ В ВОДНЫХ СРЕДАХ ПОСРЕДСТВОМ РЕАКЦИИ МЕТАТЕЗИСА ОЛЕФИНОВ

И.О. Насибуллин^а, И.С. Смирнов^а, А.Р. Курбангалиева^а, К. Танака^б

^а Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия

^б Кластер новаторских исследований RIKEN, Вако, Япония

IONasibullin@kpfu.ru

Адаптация каталитических реакций для протекания в водных средах зачастую является непростой задачей, требующей кропотливой работы по подбору подходящих условий, реагентов и катализаторов. Однако, все больший запрос на применение растворителей, безопасных для окружающей среды, а также каталитических методов модификации белков, пептидов, молекул ДНК и др., способствует развитию данного направления и разработке новых реакций в водных растворах.

В настоящей работе мы изучили возможность синтеза ароматических структур, протекающего через стадию метатезиса олефинов с замыканием цикла в водном растворе. Для этого нами были разработаны методы синтеза различных карбо- и гетероциклических субстратов для реакций метатезиса, приводящих к образованию ароматических соединений ряда нафталина, антрацена, фенантрена, карбазола, индола, бензо[*b*]тиофена и дибензо[*b*]фурана. Активность полученных субстратов была оценена в реакции с производным катализатора Ховейды-Граббса 2-го поколения и искусственного металлофермента на его основе, о котором мы сообщали ранее [1–3]. Выявлены основные закономерности в изменении реакционной способности субстратов различного структурного типа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет–2030»).

1. S. Eda et al. *Nature Catalysis*, 2019, **2**, 780–792.
2. K. Vong et al. *Nature Communications*, 2019, **10**, 5746.
3. I. Nasibullin et al. *Nature Communications*, 2022, **13**, 39.

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ СЕРНИСТЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 5-МЕНТИЛОКСИ- И 5-БОРНИЛОКСИ-2(5*H*)-ФУРАНОНОВ

А.М. Хабибрахманова^a, Э.С. Раббаниева^a, И.С. Шарафутдинов^a, Д.П. Герасимова^b, Л.З. Латыпова^{a,c}, О.А. Лодочникова^{a,b}, Д.Р. Исламов^c, А.Р. Каюмов^a, А.Р. Курбангалиева^a

^a Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова – ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

^c ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

AMHabibrahmanova@kpfu.ru

Данная работа посвящена синтезу, изучению строения и биологически активных свойств оптически чистых тиоэфиров, *бис*-тиоэфиров, серосодержащих конденсированных бициклических соединений, моно- и дисульфоксидов, моно- и дисульфонов фуранонового ряда.

В реакциях 3,4-дигалоген-5-гидрокси-2(5*H*)-фуранонов с хиральными спиртами в условиях кислотного катализа синтезированы ментиловые и борниловые эфиры фуранона с (*S*)-конфигурацией атома углерода C⁵ лактонного цикла. Далее при взаимодействии выделенных (*S*)-стереоизомеров с арилтиолами и алифатическими дитиолами в присутствии Et₃N получены оптически активные тиоэфиры и *бис*-тиоэфиры. В реакциях окисления моно- и дитиопроизводных фуранона избытком H₂O₂ в уксусной кислоте выделены хиральные моносульфоксиды, моно- и дисульфоны 5-ментилокси- и 5-борнилоксифуранонов. При действии *m*-хлорнадбензойной кислоты на арилтиоэфиры и *бис*-тиоэфиры получены соответствующие моно- и дисульфоксиды в стереоизомерно чистом виде. При взаимодействии бицикла, несущего фрагменты 2(5*H*)-фуранона и 1,4-дितिана, с монотерпеновыми спиртами в присутствии H₂SO₄ синтезированы сернистые конденсированные бициклические соединения, которые далее окислены *m*-хлорнадбензойной кислотой до оптически активных моносульфоксидов с сульфинильной группой у атома углерода, находящегося в α-положении по отношению к карбонильной группе.

Строение продуктов доказано методами спектроскопии ИК и ЯМР, методом РСА, состав подтвержден данными метода масс-спектрометрии высокого разрешения. Изучена антимикробная активность полученных фуранонов и их способность подавлять процессы образования и роста биопленок различными видами грамположительных и грамотрицательных бактерий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет–2030»). Рентгеноструктурные исследования выполнены за счет государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

СЕКЦИЯ 4 ЭНЕРГЕТИКА

ПОВЫШЕНИЕ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ТЭС

В.К. Дробышев, В.А. Романова

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

drobyshev_v.k@mail.com

Обеспечение энергетической безопасности является одним из главных приоритетов практически для любого национального правительства и многих международных организаций. Для России это отражено в "Энергетической стратегии Российской Федерации на период до 2035 года" [1].

Объектом исследования являются тепловые электростанции (ТЭС), несмотря на то, что у них есть недостатки, связанные с загрязнением окружающей среды и высокой себестоимостью электроэнергии, они используются повсеместно. Причина такой ситуации – универсальность ТЭС. Тепловые электростанции могут работать на различных видах топлива и при проектировании обязательно учитывается, какие энергоресурсы являются оптимальными для данного региона.

Основу ТЭС составляет паросиловая установка (ПСУ) — это комплекс энергетического оборудования, в котором в качестве рабочего тела используется водяной пар. Анализ практических данных работы ПСУ даёт следующую структуру распределения тепла [2]:

Вид	Количество, %
полезное тепло	32-35 %
потери в котлоагрегатах	8-12 %
потери на турбине	1-2 %
потери при конденсации	50-55 %

Очевидно, что важной для эффективного использования выделенной при сжигании топлива энергии является работа конденсатора. Задача настоящего исследования – предложить такие инновации, которые позволили бы продвинуться в направлении увеличения энергоэффективности процесса электрогенерации на ТЭС.

В настоящее время существует большое количество органических веществ с температурой кипения, близкой к температуре конденсации, при проектном уровне $t = 25 - 30$ °С. К ним относятся так называемые «хладагенты» или «фреоны». Если на водяную сторону конденсатора «завести» такое вещество (например, с температурой кипения 25 °С и скрытой теплотой парообразования 250 КДж/кг), то кратность циркуляции уменьшится в несколько раз. Следующая инновация заключается в том, чтобы на тракте подвода охлаждающей воды установить тепловой насос (ТН), то за счет этого можно снизить температуру охлаждающей воды, а затем и температуру конденсации до проектной и получить увеличение мощности электрогенератора [3].

Необходимость введения инноваций в теплоэнергетике вызвана ситуацией в экологии и требованиями снижения расхода углеводородного топлива как источника загрязнения окружающей среды.

1. Энергетическая стратегия РФ на период до 2035 г. Утверждена Постановлением Правительства РФ от 9 июня 2020 г. № 1523-р.
2. Фукс Г.И. Тепловой и энергетический балансы тепловой установки // Известия Томского политехнического института. 1952. Т. 69. С. 87 – 92.
3. Пат. 2689233 РФ. Способ повышения энергоэффективности и устройство для его осу- ветвления / Стерлигов В.В., Пуликов П.С., Стерлигов М.В. Заявл. 21.06.2018; опубл. 24.05.2019.

АККУМУЛЯЦИЯ ЭНЕРГИИ СТЕРЖНЕВЫМ КОСМИЧЕСКИМ АППАРАТОМ ДЛЯ ОРБИТАЛЬНОГО МАНЕВРИРОВАНИЯ

А.А. Екимовская

ФГБОУ ВО НИУ «Московский авиационный институт», Москва, Россия

any_ekimovskaya03@mail.ru

В работе продолжается исследование способа получения импульса для орбитального маневрирования космического аппарата (КА) без химического топлива. Используется аккумулированная механическая энергия вращения орбитальной системы. В этой работе система предполагается стержневой, а не точечной [1,2]. В простейшем случае – это вращающийся отрезок. Решение задачи началось с общего случая, когда разрыв связи происходит не в центре вращения, а в произвольной точке. Это дедуктивный метод изучения системы, от общего к частному. Предмет исследования – величины скоростей, которые получают две новые части разорвавшегося отрезка. Эти скорости необходимы для орбитальных переходов. В этой работе орбитальные переходы не изучаются, но постоянно упоминаются с первичными оценками новых орбит. Такое упоминание необходимо для достижения конечной цели исследования, связанной с орбитальным маневрированием вращающейся космической системы. Формулы для расчёта параметров новой орбиты, после получения телом импульса, взяты из баллистической литературы и книг по небесной механике, а также из предыдущих авторских работ [1,2]. Основным методом исследования является теоретический материал о вращении абсолютно твёрдого тела. Задача о несимметричном разрыве вращающегося отрезка решена в системе центра масс КА с помощью эпюры скоростей и понятия мгновенного центра вращения. Результат решения проверен на предмет выполнения законов сохранения энергии, импульса, момента импульса и массы. Доказана возможность орбитального перехода Гомана разрывом вращающегося отрезка как аккумулятора механической вращательной энергии.

1. Мирер С.А. Механика космического полёта. Орбитальное движение. Учебное пособие. Часть 2. – М.: МФТИ (НИУ), 2013.
2. Екимовская А.А. Способ межорбитального маневрирования космического аппарата. Заявка № 2021126157 от 06.09.2021 на патент на изобретение.

РАЗРАБОТКА ОПТИМАЛЬНОЙ ТЕХНОЛОГИИ КИСЛОТНОЙ ОБРАБОТКИ ГОРИЗОНТАЛЬНЫХ СКВАЖИН В УСЛОВИЯХ КАРБОНАТНЫХ КОЛЛЕКТОРОВ

А.А. Имамутдинова, А.В. Лысенков

Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

adelina.imamutdinova99@mail.ru

Важным фактором успешности применения горизонтальных скважин (ГС) является сохранение коллекторских свойств пласта в окрестности ствола [1]. В связи с тем, что кислотная обработка (КО) ГС без применения специальных технологий чаще всего является неэффективной, вследствие недостаточного распределения кислотного состава (КС) [1, 2], вопрос подбора оптимальной технологии воздействия с целью интенсификации добычи нефти является актуальным. При проектировании КО призабойной зоны карбонатных пластов, представленных доломитом и имеющих низкую пластовую температуру, низкую проницаемость матрицы и развитую систему трещин, требуется совершенствование технологии КО ГС с учетом данных особенностей [1].

Цель работы – комплексное обоснование технологического решения по повышению эффективности КО ГС в условиях низкотемпературных доломитовых коллекторов.

Основными проблемами и направлениями для поиска решений в части оптимизации технологии КО ГС в условиях рассматриваемого объекта является низкая доля работающих интервалов по отношению к общей длине открытого ствола, низкая скорость реакции кислоты с «холодным» доломитом. Предлагаемая в работе технология включает в себя предварительную закачку химического отклонителя через гибкую насосно-компрессорную трубу с последующей обработкой целевых низкопроницаемых интервалов ГС основным КС с повышенной концентрацией соляной кислоты и реагентом-модификатором, ускоряющим скорость реакции состава с карбонатной породой, что позволяет повысить эффективность КО в данных условиях.

1. Economides M.J., Nolte K.G. Reservoir Stimulation. 3rd Edition. West Sussex, England: John Wiley & Sons, Ltd. 2000. 856 с.
2. Nasr-El-Din H. A. et al. A new effective stimulation treatment for long horizontal wells drilled in carbonate reservoirs. SPE Production & Operations. 2006. Т. 21. №. 03. С. 330-338.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ НЕФТИ И ЕЁ КОМПОНЕНТ МЕТОДОМ ЯМР

Т.А. Казбаев, Д.С. Иванов

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

timur-kazbaev29@mail.ru

По данным ООН, мировые запасы природных битумов и тяжелых нефтей составляют 260 млрд. тонн. Добыча и в том числе разработка тяжелой, высоковязкой нефти и природных битумов (ПБ) представляет большую сложность и является весьма актуальной задачей в особенности для нефтедобывающих регионов с развитой нефтяной промышленностью, инфраструктурой. Одним из таких регионов является Республика Татарстан, занимающая лидирующее место среди всех регионов, на территории которой находится около 36% запасов природных битумов России. Как отмечается в работе [1] высокое содержание парафинов, асфальтенов и смол характерное для тяжелых нефтей и битумов приводит к увеличению вязкости. При этом в этих объектах уже не наблюдается так явно, как для легких нефтей, корреляция между структурно-динамическими свойствами нефти и её молекулярным составом [2].

В работе для проведения неинвазивных исследований молекулярной организации и взаимодействия между наиболее высокомолекулярными компонентами нефти был использован метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР). В результате исследования показано, что увеличение концентрации асфальтенов и парафинов удовлетворительно коррелирует с ростом твердотельной компоненты сигнала ЯМР. Вместе с этим исследований найдено характеристическое время поперечной релаксации T_2 для смолы, которая сольватирует конденсированную кольцевую часть асфальтенов и стабилизирует агрегат смола-асфальтен. По полученным данным о временах спин-спиновой релаксации предложена гипотеза верификации взаимодействия смол с парафинами.

1. Piyin S. et al. Asphaltenes in heavy crude oil: Designation, precipitation, solutions, and effects on viscosity // Journal of Petroleum Science and Engineering. – 2016. – V. 147. – P. 211-217.
2. Ivanov D.S. The processes of aggregation and dissolution in model systems resins asphaltene by NMR / D.S. Ivanov, E.E. Barskaya, V.D. Skirda // Electronic Journal Magnetic Resonance in Solids. – 2019. – V.21. №2. – 19202 12 pp.

ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЕ В ТЕПЛОСНАБЖЕНИИ

К.В. Коныжов, А.И. Минибаев

ФГБОУ ВО «КГЭУ», Казань, Россия

Konizhov.kirill@mail.ru

Аннотация: в работе рассмотрена проблема повышения эффективности энергосбережения в теплоснабжении. Рассказано, что данная проблема носит масштабный характер. В данной работе предложены методы и пути повышения энергосбережения.

Ключевые слова: энергосбережение, автоматизация ЦТП, диспетчеризация, система теплоснабжения, кожухотрубные теплообменники, систем автоматического регулирования систем отопления.

Одним из нормативных документов, призывающих население России повышать энерго- и ресурсосбережение, является федеральный закон № 261 «Об энергосбережении и о повышении энергетической эффективности, и о внесении изменений в отдельные законодательные акты Российской Федерации», принятый 23 ноября 2009 года. [1].

Основные мероприятия по модернизации центральных тепловых пунктов (ЦТП)

Теперь рассмотрим мероприятия по энергосбережению непосредственно в ЦТП.

Большинство энергосберегающих мероприятий в тепловых пунктах направлены на экономию энергоресурсов у конечных потребителей. К основным мероприятиям по модернизации ЦТП относятся следующие [2]:

- использование оборудования частотно-регулируемого привода на насосах холодного и горячего водоснабжения (ХВС и ГВС);

- автоматизация ЦТП;

- диспетчеризация;

- замена кожухотрубных теплообменников на пластинчатые;

- внедрение систем автоматического регулирования зависимых систем отопления

Это позволяет сделать вывод, что мероприятия по модернизации ЦТП приносят значительный экономический эффект даже в масштабах одной энергетической компании в одном городе. Что при проведении данных мероприятий по модернизации ЦТП по всей стране, можно сэкономить огромное количество энергоресурсов тем самым увеличить выручку компаний.

1. ГОСТ-Р-57114-2016 национальный стандарт РФ. Единая энергетическая система и изолированно работающие энергосистемы. Оперативно-диспетчерское управление в электроэнергетике и оперативно-технологическое управление.

2. О реконструкции центральных тепловых пунктов (ЦТП) департамента энергетики и энергосбережения: постановление № 243 правительства Москвы.

3. Энергосбережение и повышение энергетической эффективности: гос. программа РФ; утв. распоряжением Правительства Российской Федерации от 23 сентября 2020 г. № 2446-р

4. Петров, А. Д. Сравнение пластинчатых и кожухотрубных теплообменных аппаратов / А. Д. Петров, С. А. Сысолятин, В. В. Ильин. — Текст: непосредственный // Молодой ученый. — 2017. — № 18 (152). — С. 65-70.

5. Покотиллов В.В. Регулирующие клапаны автоматизированных систем тепло- и холодоснабжения. Издательство: ГЕРЦ Арматурен ГмБх г. 2010 стр. 178 (18-19 стр.)

АНАЛИЗ ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЯ, ЭНЕРГООБЕСПЕЧЕНИЯ И ЭФФЕКТИВНЫХ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ЭНЕРГИИ В ПРЕДПРИЯТИЯХ

В.А. Романова, В.К. Дробышев

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

romanovaviktoria2908@gmail.com

Энергетика является главной отраслей в экономики. Именно она обеспечивает создает предпосылки для высокого благосостояния населения страны и укрепления авторитета и влияния государства на международной арене. Энергосбережение сейчас становится одним из приоритетов политики любой компании, работающей в сфере производства или сервиса. Это обусловлено тем, что удельные энергозатраты на производство основных видов продукции в России значительно выше, чем в западноевропейских странах. Одной из основных причин такого положения являются устаревшие энергорасточительные технологии, оборудование и приборы. Расходы на энергетические ресурсы (ЭР) современного промышленного предприятия является одной из основополагающих статей. Теплоэнергетическая система промышленного предприятия представляет собой сложное образование, предназначенное для обеспечения потребителей ЭР всех требуемых видов [1].

Энергообеспечение предприятий предусматривает совокупность средств и методов, предназначенных для разработки и применения установок и систем производящих, трансформирующих, распределяющих и потребляющих тепловую, электрическую и иные виды энергии, обеспечивающие функционирование промышленных предприятий [2]. Для оптимизации процесса производства на предприятиях применяются электроприводы со встроенными функциями снижения энергопотребления. Благодаря гибкому изменению частоты их вращения в зависимости от нагрузки энергосбережение может составить 30-50%. Важнейшим мероприятием по энергосбережению в зданиях станут также установка батарей отопления с автоматической регуляцией. Применение систем вентиляции, имеющих функцию повторного использования тепловой энергии, позволят сберечь еще больше энергии.

К примеру, как роторно-пульсационные установки для отопления и горячего водоснабжения. Такие генераторы позволяют нагревать воду, иницируя в ней за счет высоких скоростей вращения ротора (5000 об/мин.) физико-химические процессы, сопровождающиеся большим выделением тепловой энергии. Ротор аппарата приводится во вращение при помощи электродвигателя. Данные тепловые генераторы обладают высокой эффективностью, коэффициент преобразования энергии составляет около 100%. Причем, чем выше мощность установки, тем выше ее эффективность за счет увеличения удельной поверхности ротор-статор. Суть процессов состоит в возникновении и схлопывании пузырьков, содержащих пар или газ при адиабатическом нагреве вплоть до 10000 °С. Происходит генерация тепла самой жидкостью, без теплообменных поверхностей обеспечивает очень эффективный процесс разогрева. КПД гидротеплогенератора (отношение полученной тепловой энергии к затраченной электрической энергии) близок к единице.

1. Об утверждении Доктрины энергетической безопасности Российской Федерации: Указ Президента РФ, 13 мая 2019 г., № 216.
2. Об утверждении энергосбережения и повышения энергетической эффективности и о признании утратившими силу некоторых актов Правительства Российской Федерации: Постановление Правительства РФ, 13 февраля 2021 г., № 161.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ОБЛАГОРАЖИВАНИЯ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ ЯРЕГСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Г.Х. Ситдикова, И.И. Мухаматдинов

Институт геологии и нефтегазовых технологий КФУ, Казань, Россия

gyzelsitdikova97@mail.ru

Запасы традиционных нефтей стремительно уменьшаются, в связи с этим растёт доля запасов трудноизвлекаемых нефтей. К последним относятся высоковязкие нефти и природные битумы, для извлечения которых применяются термические методы добычи. Использование катализаторов вместе с закачкой пара при внутрипластовом облагораживании нефти дает много преимуществ, среди которых увеличение степени нефтеизвлечения, улучшение физико-химических и реологических характеристик нефти. [1]

Целью работы являлось исследование эффективности катализатора акватермолиза на основе железа в пластовых условиях для внутрипластового облагораживания высоковязкой нефти Ярегского месторождения при паротепловом воздействии.

Проводилось исследование преобразования состава высоковязкой нефти при паротепловом воздействии в присутствии и отсутствии донора водорода и катализатора в процессе гидротермального воздействия при температуре 250 °С в течение 24, 48 и 72 часов в парогазовой атмосфере при давлении 45 бар, после экспериментов битумоид был экстрагирован из нефтесодержащей породы. Определен состав газообразных продуктов, результаты которого свидетельствуют о значительном росте содержания газов при наличии катализатора. Результаты определения группового химического состава говорят о снижении количества высокомолекулярных соединений. На основе проведенных исследований показано, что применение катализатора акватермолиза на основе железа позволяет улучшить компонентный и элементный состав газообразных продуктов и провести облагораживание нефти в пластовых условиях.

1. Липаев, А. А. Разработка месторождений тяжёлых нефтей и природных битумов [Текст] / А. А. Липаев. – М.,И.: Институт компьютерных исследований, 2013. – 483 с.

ТРЕНАЖЕРНАЯ ПОДГОТОВКА ЭНЕРГЕТИКОВ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ В УНИВЕРСИТЕТЕ

Д.К. Фатхуллина, А.И. Минибаев

ФГБОУ ВО «КГЭУ», Казань, Россия

fatkhullina_n_kki@mail.ru

Одним из важных направлений работы по повышению эффективности предприятий большой энергетики является автоматизация производственных процессов на основе использования цифровых технологий, в связи с этим повышается требование к квалификации и профессиональной подготовке персонала предприятий.

Решением данных вопросов можно считать учебные (противоаварийные) тренировки [1], которые являются обязательной формой производственно-технического обучения и повышения квалификации оперативного персонала ТЭС.

На кафедре «Атомные и тепловые электрических станции» ФГБОУ ВО «КГЭУ» создана сеть классов с полномасштабными компьютерными тренажёрами атомных и тепловых электрических станций [2], способствующими формированию у студентов по окончании университета компетенций достаточных для допуска их к рабочему месту машинистов паровых турбин и энергетических котлов, инженеров по эксплуатации ядерных энергетических установок и другого оборудования объектов энергетики.

Тренажеры представленные на кафедре «АТЭС» позволяют отработать как стандартные процедуры по запуску оборудования и ведению режимов энергообъектов, так и внештатные (аварийные) ситуации, решение которых позволит персоналу станции быть готовыми к различным ситуациям уже на действующих предприятиях.

1. Приказ №27 от 26.01.2021 г. «Об утверждении Правил проведения противоаварийных тренировок в организациях электроэнергетики РФ».
2. Тренажерно-аналитический комплекс для электростанции с поперечными связями: учеб. пособие / Н.Д. Чичирова, Р.В. Бускин, И.В. Евгеньев, С.М. Власов, А.И. Минибаев; Под общ. ред. Н.Д. Чичировой. – Казань: Казан. гос. энерг. унт, 2018. – 221 с.

ПРОВЕРКА ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПЛЕКСА С ЖЕЛЕЗОМ В РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

П.Я. Эндерс^{a,b}, Е.А. Соловьев^{a,b}, С.Т. Минзанова^{a,b}, К.В. Холин^{a,b}

^a *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань, Россия*

^b *Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

enderspolina@mail.ru

Электрокаталитическое восстановление CO_2 является эффективной стратегией решения глобальных экологических проблем путем преобразования газа в полезные продукты. [1] Для проверки каталитических свойств комплекса пектата натрия с железом ПГ-NaFe в реакции восстановления углекислого газа был использован метод циклической вольтамперометрии.

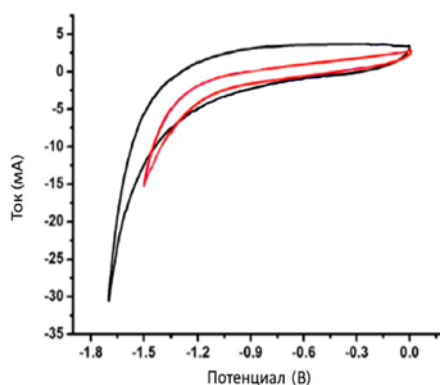


Рисунок 1 – Циклические вольтамперограммы при подаче CO_2 на «чистом» (черная кривая) и модифицированном комплексом ПГ-NaFe (красная кривая) стеклоуглеродном электроде.

На рисунке 1 графика сравнения двух кривых циклических вольтамперограмм видно, что комплекс ПГ-NaFe проявляет каталитическую активность в отношении реакции восстановления CO_2 со смещением потенциала E_{onset} на 300 мВ.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

1. C. Arana et al. Electrocatalytic reduction of carbon dioxide with iron, cobalt, and nickel complexes of terdentate ligands // *Inorg. Chem. Rev.* – 1992. – Vol. 31. – P. 3680.

**СЕКЦИЯ 5 СОВРЕМЕННЫЕ ИТ-
ТЕХНОЛОГИИ, РОБОТОТЕХНИКА И
ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ
СИСТЕМЫ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

ОБОБЩЕННЫЙ МЕТОД МИНИМАЛЬНЫХ НЕВЯЗОК ДЛЯ МНОГИХ ПРАВЫХ ЧАСТЕЙ

Б.И. Валиахметов^а, Д.А. Желтков^б

^а *Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

^б *Институт Вычислительной Математики РАН, Москва, Россия*

valiahmetovbulat@mail.ru

В прикладных задачах нередко возникает необходимость решать системы линейных уравнений с многими правыми частями: $Ax_j = b_j, j = 1, \dots, M$. Весьма эффективными являются методы, основанные на пространствах Крылова. Одним из таких методов является обобщенный метод сопряженных невязок (GCR) [1]. На k -м шаге требуется хранить два базиса: $V_k \subset AK_k$ и $P_k \subset K_k$, где $AP_k = V_k$. В свою очередь, обобщенный метод минимальных невязок (GMRES) [2] для одной правой части в точной арифметике эквивалентен GCR, но требует хранения только одного ортонормированного базиса $Q_{k+1} \subset K_{k+1}$. Одним из достоинств GCR, в отличие от GMRES, является его естественное обобщение для линейных систем с многими правыми частями [1].

Мы предлагаем основанный на GMRES метод решения систем с последовательно многими правыми частями, требующий хранения только одного базиса и в точной арифметике эквивалентный GCR [1]. Его основная идея заключается в определенном выборе базиса P_k и его пересчете. Нами выполнена реализация построенного алгоритма на языке C++ с использованием техники шаблонов, а также MPI и OpenMP параллелизма.

Работа выполнена при поддержке проекта Российского научного фонда №19-11-00338-П.

1. Lingen F. J. A Generalised Conjugate Residual method for the solution of nonsymmetric systems of equations with multiple right-hand sides // International journal for numerical methods in engineering. – 1999. – Т. 44. – №. 5. – С. 641-656.
2. Saad Y., Schultz M. H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM Journal on scientific and statistical computing. – 1986. – Т. 7. – №. 3. – С. 856-869.

О ЗАДАЧЕ ДИФРАКЦИИ В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ВОЛНОВОДНОЙ СТРУКТУРЕ

А.М. Гиниатуллин, А.Н. Хайбуллин

Казанский(Приволжский) Государственный Университет, Казань, Россия

aginiatullin@gmail.com, almaz.khaybullin@mail.ru

В работе исследуется задача ТЕ – поляризованной электромагнитной волны в полубесконечной прямоугольной волноводной структуре с резонансной областью в конце. Поставленная задача решается в зависимости от значения спектрального параметра. В рамках этой работы разработана многофункциональная программа в вычислительной среде Matlab с графическим интерфейсом для решения поставленной задачи. Она позволяет построить резонансную кривую. Кроме того, в разработанной программе реализована возможность графического и визуального исследования спектральных кривых для данной волноводной структуры.

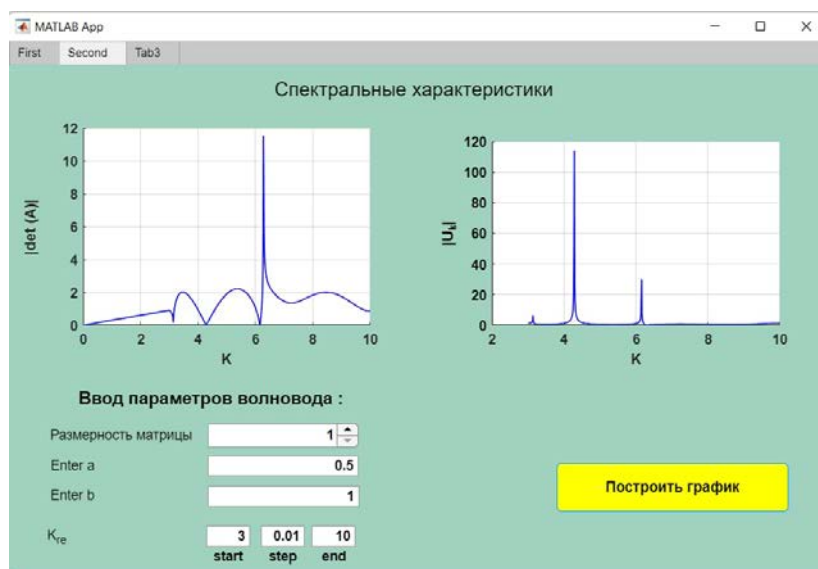


Рисунок 1 – Интерфейс программы.

1. Abgaryan G.V, Pleshchinskii N.B., On the Eigen Frequencies of Rectangular Resonator with a Hole in the Wall//Lobachevskii Journal of Mathematics. - 2019. - Vol.40, Is.10. - P.1631-1639.

ДЕМОНСТРАЦИОННО-РАСЧЁТНАЯ ПРОГРАММА ОРБИТАЛЬНОГО ПЕРЕХОДА ГОМАНА

А.А. Екимовская

ФГБОУ ВО НИУ «Московский авиационный институт», Москва, Россия

any_ekimovskaya03@mail.ru

Работа связана с изучением манёвра Гомана новым видом космических аппаратов (КА) – вращающимися космическими системами. При обсуждении результатов исследований, особенно в неподготовленной аудитории, появилась трудность объяснения орбитального маневрирования [1]. Цель работы учебная, дидактическая. Сложность задач внешней баллистики обусловлена переменным значением и направлением силы тяготения единичного тела в поле центра притяжения [2]. Главным теоретическим материалом по небесной механике являются законы Кеплера. Предлагаемая компьютерная модель выдаёт результаты в виде плоских графиков на экране монитора. Работа выполнена с учебной целью, но позволяет быстро проверять правильность решения задач орбитального маневрирования КА. Для зрительного восприятия создана интерактивная компьютерная модель, представленная в виде EXE-файла размером менее 30кб. Для достижения цели работы пришлось подключить модули CRT и GRAPH в PASCAL-программе и освоить работу функций графического расширения компилятора. От пользователя требуется в диалоговом режиме ввести высоты начальной и конечной круговых орбит, чтобы получить на экране расчётные скорости первого и второго импульсов в манёвре Гомана, дополненные масштабной иллюстрацией орбитального перехода. Требуемый в качестве исходных данных эксцентриситет переходного эллипса не влияет на результат, но позволяет учесть размер Земли, чтобы КА не упал на её поверхность при вытянутых эллипсах. Дополнительно на экран выводятся высоты двух орбит и круговые скорости на этих двух орбитах. Программа позволяет изучать как восходящий манёвр Гомана, так и нисходящий, важный для возвращаемых на Землю космических аппаратов.

1. Перельман Я.И. Занимательная физика. – Изд. СЭКЭО, 2020. – 448 с.
2. Мирер С.А. Механика космического полёта. Орбитальное движение. Учебное пособие. Часть 2. – М.: МФТИ (НИУ), 2013.

КАТКИ РЁЛО ДЛЯ ТЯЖЁЛОГО МАШИНОСТРОЕНИЯ

К.Д. Кирнева

ФГБОУ ВО НИУ МАИ, МБОУ «СОШ №12», Королёв, Московская область, Россия

Kirneva.Kristina@bk.ru

Работа относится к области тяжёлого машиностроения: металлургии, прокатных станов, транспортных платформ, горных работ – везде, где требуется перемещать тяжёлые грузы. Цель работы была сформулирована после изучения истории транспортировки Гром-камня для основания памятника Петру Первому. Первоначальная масса камня 2000 тонн, длина пути 12 километров. Специальная транспортная машина состояла из брёвен с желобами и опорных шаров. Трудности перемещения возникали постоянно, особенно на склонах. После анализа этого исторического факта появилось предложение усовершенствовать процесс перемещения тяжёлых грузов. Во-первых, надо заменить опорные шары на опорные ролики, чтобы уменьшить давление. Во-вторых, сечение опорных роликов надо сделать не круглым, а в виде треугольника Рёло – кривой постоянной ширины. Это означает, что тяжёлый груз не будет перемещаться вверх-вниз, что важно при большой массе, будет двигаться точно так, как на круглых цилиндрических катках. Преимущество предложенных катков Рёло заключается в важном свойстве безопасности работы с оборудованием на склонах. Треугольник Рёло не скатывается с наклонной плоскости, как цилиндр. Освободившийся из-под груза каток Рёло остаётся лежать на склоне, рабочим не нужно его удерживать или останавливать, достаточно спокойно и не спеша переместить вперёд, перед транспортируемым грузом. Циклический процесс освобождения и закладки катков Рёло повторяется. Для проверки правильности предложенного технического решения была изготовлена лабораторная установка. Треугольники Рёло выпилены из досок, а потом резьбовыми шпильками стянуты и склеены в опорные ролики. Трёх-четырёх катков Рёло вполне достаточно для демонстрационного эксперимента и для определения максимального наклона плоскости, при котором они не будут скатываться. Перспектива работы – создание рёлоподшипника.

1. Кристина Кирнева. Катки Рёло. – 16.11.2022. – Электронный ресурс (видеоролик 3:25): <https://youtu.be/tHmfL58c1LU>

ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ В ХЛЕБОПЕКАРНОМ ПРОИЗВОДСТВЕ

Я.В. Малолеткова, Е.Н. Григорьева, С.В. Сусарев

ФГБОУ ВО Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

Yana.maloletkova@yandex.ru

В настоящее время пищевая и перерабатывающая промышленность Российской Федерации представляет собой одну из стратегических отраслей экономики, которая призвана обеспечить население страны необходимыми по количеству и качеству продуктами питания [1].

При производстве хлебобулочных изделий важным является не только оценка исходного сырья, но и прогнозная оценка качества производимой продукции в зависимости от начальных ингредиентов. В Самарском государственном техническом университете на кафедре Автоматизация и управление технологическими процессами ведутся исследования по обработки первичных экспериментальные данные в виде нестационарных информационных потоков для выявления новых закономерностей их функционирования.

Разработка и реализация такого подхода на примере хлебопекарного производства, позволяет синтезировать не только новые методы обработки информации, отвечающие потребностям предметной области, но и предложить новую классификацию критериев для контроля и диагностики состояний биотехнологических систем.

1. Л.В. Тугачева, О.С. Капнинова Современное состояние и перспективы развития пищевой промышленности в России // Индустриальная экономика, 2021 №3 45-52

О ЗАДАЧЕ МАЛОРАНГОВЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ МАТРИЦ В ЧЕБЫШЕВСКОЙ НОРМЕ

С.В. Морозов, Н.Л. Замарашкин

*Институт Вычислительной Математики им. Марчука РАН, Москва, Россия**stanis-morozov@yandex.ru*

Матрицы малого ранга встречаются в науке повсеместно. Они находят многочисленные применения в вычислительной математике, вычислительной гидродинамике, рекомендательных системах, машинном обучении и многих других задачах, как инструмент малопараметрического приближения матриц. На сегодняшний день, большинство методов малоранговых приближений строят аппроксимации в норме фробениуса. В этом случае качество приближения напрямую зависит от скорости убывания сингулярных чисел матрицы. В то же время недавно была доказана следующая фундаментальная теорема [1], которая показывает, что в чебышевской норме возможны малоранговые приближения даже для матриц без убывания сингулярных чисел:

Теорема. Пусть $X \in R^{m \times n}$ где $m \geq n$ и $0 < \varepsilon < 1$. Тогда при $r = 72 \log(2n+1)/\varepsilon^2$ имеем $\inf_{Y \leq r} \|X - Y\|_C \leq \varepsilon \|X\|_2$

В данной работе предлагается эффективный метод построения малоранговых матриц в норме Чебышева. Для этого строится метод нахождения оптимального решения задачи

$\mu = \inf_{U \in R^{m \times n}} \|A - UV^T\|_C$, а затем применяется метод переменных направлений. Результаты

работы метода позволяют получать точность не хуже заявленной в [1]. Кроме того, в работе описывается метод построения оптимальных приближений ранга 1.

Работа поддержана Московским центром фундаментальной и прикладной математики (соглашение с Минобрнауки No. 075-15-2022-286).

1. M. Udell, A. Townsend, Why are big data matrices approximately low rank?, SIAM Journal on Mathematics of Data Science, (2019)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРИОДА ИНДУКЦИИ В РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ *n*-ДЕКАНА В ПРИСУТСТВИИ α -НАФТИЛАМИНА

Р.Н. Насретдинова, Г.Г. Гарифуллина

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

nasretdinovarn@mail.ru

Окисление органических соединений относится к классу вырожденно-разветвленных цепных реакций, механизм которых широко изучен. В присутствии добавок ингибиторов на кинетических кривых поглощения кислорода появляется период индукции, в течение которого полностью тормозится процесс окисления. Период индукции – одна из важных кинетических особенностей самоускоряющихся реакций. Величины периода индукции используются для описания кинетического поведения реакционной системы, выявления деталей механизмов реакций, характеристики активности ингибиторов. Период индукции является количественной характеристикой действия ингибиторов окисления и определяется как интервал времени, в течение которого молекулам ингибитора удается тормозить процесс окисления. Экспериментально период индукции отсчитывается с момента, когда реакция начала протекать в режиме прогрессирующего самоускорения и до момента, при котором это самоускорение резко усиливается.

В настоящей работе использован программный комплекс для моделирования периода индукции в реакции ингибированного α -нафтиламином окисления *n*-декана. Для математической идентификации кинетической модели реакции ингибированного окисления *n*-декана применялся программный комплекс, разработанный при поддержке фонда Бортника в рамках программы «У.М.Н.И.К.». Решение прямой кинетической задачи проводили полуживым методом Мишельсена с автоматическим выбором шага интегрирования. Решение обратных кинетических задач осуществлялось при помощи интегрированного в ХимКинОптим индексного метода глобальной оптимизации, разрабатываемого в Нижегородской школе глобальной оптимизации, использующего технологии параллельных вычислений.

В лабораторных условиях модельная реакция ингибированного окисления *n*-декана проводили при температуре 90°C в присутствии инициатора окисления. Кинетику процесса изучали по поглощению кислорода. Скорость поглощения кислорода измеряли на универсальной дифференциальной манометрической установке. Концентрацию первичного молекулярного продукта окисления – гидроперекиси – определяли иодометрическим титрованием. Константы скорости элементарных реакций продолжения и обрыва цепей окисления *n*-декана подобраны, исходя из литературных данных [1].

Результаты расчетов величины периода индукции по программе «У.М.Н.И.К» показали совпадение индукционных периодов с экспериментальными данными, как по кинетике поглощения кислорода, так и по кинетике накопления первичного молекулярного продукта окисления - гидроперекиси для реакции ингибированного окисления декана.

1. Денисов Е.Т. Константы скорости гомолитических жидкофазных реакций. – Москва: Наука, 1971. – 712 С.

CFD-МОДЕЛИРОВАНИЕ АЭРОДИНАМИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СРЕДСТВ АВТОМАТИЗАЦИИ, НАПИСАННЫХ В PYTHON

Н.А. Шадымов, В.Д. Папков

СамГТУ, Самара, Россия

papkov.vd@gmail.com

CFD моделирование является одной из самых быстрорастущих отраслей в наше время [1]. В современном мире все больше внимания уделяется автоматизации решения CFD, во главе этого ставится задача снизить затрачиваемые ресурсы, такие как время и электроэнергия, на получение и обработку результатов полученных в ходе расчета.

В работе рассмотрена задача аэродинамики с использованием средств автоматизации написанных в python на основе численного моделирования в программном продукте Ansys Fluent. Одной из задач аэродинамики заключалась в том, что турбулентный поток под разными углами атаки обдувает крыло NASA 0018. Цель работы заключается в получении достаточно точных аэродинамических данных: коэффициента подъема и коэффициента сопротивления крыла NASA 0018 и автоматизации получения этих аэродинамических данных.

Реализация программы автоматизации была основана на языке программирования Python. Данный язык программирования позволяет вести подсчет времени на решение задачи и дает возможность отслеживать насколько эффективна будет та или иная автоматизация, что позволяет гибко вести настройку исполняемого кода или программы. Благодаря хорошей читаемости кода можно редактировать количество и набор задаваемых параметров, их обработку и какие выходные данные мы хотим получить. Данное средство автоматизации может быть адаптировано и под более сложные проекты [2].

С помощью средств автоматизации были рассчитаны коэффициенты подъема и сопротивления, которые хорошо согласуются с эталонными значениями, полученными в лаборатории Гринблатта[3]. Результаты показали, что используя средство автоматизации, предложенное нами, позволило нам снизить время расчета в среднем на 17% по сравнению с ручным вводом-запуском.

1. Jenkins Meg. Simscale Blog. URL: "<https://www.simscale.com/blog/future-of-cloud-computing-cfd-engineers/>"(06.07.2022).
2. [Testing Xperts]. URL: "<https://www.testingxperts.com/blog/automation-testing-python/>"(06.07.2022).
3. Flow Control Lab, Room 325, Faculty of Mechanical Engineering, Technion - Israel Institute of Technology, Technion City, Haifa 3200003, <https://www.flowcontrollab.com/>.

О РЕЗОНАНСНЫХ ЧАСТОТАХ ОТКРЫТОГО ВОЛНОВОДНОГО РЕЗОНАТОРА

К.А. Романов, А.Э. Шипило

*Институт Вычислительной Математики и Информационных Технологий, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия**kirilinka320@gmail.com, shadowfire-1@mail.com*

Рассмотрим задачу дифракции двумерной ТЕ-поляризованной электромагнитной волны в бесконечном прямоугольном волноводе с металлической диафрагмой конечной толщины относительно резонансной области II (рис. 1).

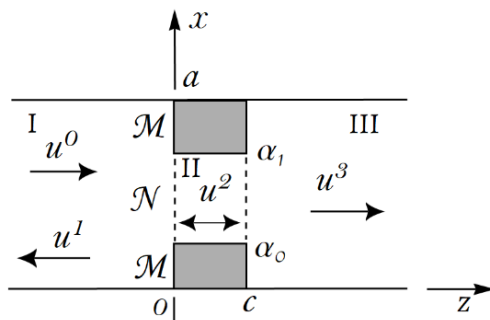


Рисунок 1 – Бесконечный волновод с диафрагмой конечной толщины.

Математическая модель, соответствующая данной физической задаче, согласно [1], сводится к решению задачи Штурма-Лиувилля для уравнения Гельмгольца. Решение этой задачи методом интегрально-сумматорных тождеств позволяет свести исходную задачу к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений (БСЛАУ)

$$\gamma_k^{\text{II}} b_k + \sum_{n=1}^{+\infty} b_n \sum_{m=1}^{+\infty} \gamma_m J_{nm} J_{km} - \gamma_k^{\text{II}} c_k + \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \sum_{m=1}^{+\infty} \gamma_m J_{nm} J_{km} = 2\gamma_k J_{kl}, k = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

$$b_k \gamma_k^{\text{II}} e^{i\gamma_k^{\text{II}} c} - \sum_{n=1}^{+\infty} b_n e^{i\gamma_n^{\text{II}} c} \sum_{m=1}^{+\infty} \gamma_m J_{nm} J_{km} - c_k \gamma_k^{\text{II}} e^{-i\gamma_k^{\text{II}} c} - \sum_{n=1}^{+\infty} c_n e^{-i\gamma_n^{\text{II}} c} \sum_{m=1}^{+\infty} \gamma_m J_{nm} J_{km} = 0, \quad (2)$$

относительно коэффициентов b_n и c_n разложения потенциальной функции u^2 .

В работе проводится поиск вещественных значений частот, при которых наблюдается резонанс в бесконечном волноводе с диафрагмой конечной толщины. Явление резонанса равносильно нулю определителей матрицы (1) и (2).

1. Abgaryan G. V. Electromagnetic Wave Diffraction on a Metal Diaphragm of Finite Thickness // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2021. – Vol. 42, – Is. 6. – P. 1328-1334.

ПРИМЕНЕНИЕ КЛАССИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ОБНАРУЖЕНИЯ ОБЪЕКТОВ ДЛЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИМ ИНТЕРФЕЙСОМ

А.А. Рудь^a, С.А. Рудь^a, А. Николаев^{a,b}

^a Самарский университет, Самара, Россия

^b СФ ФИАН, Самара, Россия

Sasha_.96@mail.ru

Способы взаимодействия с пользовательским интерфейсом desktop-приложений не ограничиваются самим пользователем. В сфере автоматизированного тестирования программного обеспечения существует потребность в распознавании компонентов приложения для взаимодействия. Распознавание включает в себя обнаружение объектов интереса с последующей классификацией.

В настоящей работе для обнаружения компонентов пользовательского интерфейса desktop-приложений использовались классические методы выделения границ. Стоит отметить, что существует нейросетевой подход к решению данной задачи. Изображение пользовательского интерфейса переводилось в оттенки серого, к которому затем применялся оператор обнаружения границ. Были исследованы оператор Собеля, оператор Кэнни, дискретный оператор Лапласа и оператор Прюитт. Полученные таким образом элементы управления накладываются друг на друга. Для устранения этого эффекта к компонентам применялась фильтрация на основе вхождений одних элементов в другие, а также алгоритм NMS [1]. Для определения класса компонента был размечен набор данных и обучена свёрточная нейронная сеть.

В результате настоящей работы был разработан сервис на Python с использованием FastAPI, позволяющий классическими методами распознавать элементы пользовательского интерфейса desktop-приложений.

Авторы выражают благодарность ООО «ЛАНИТ Экспертиза» за предоставленные вычислительные ресурсы, без которых не было бы настоящей работы.

1. Neubeck A., Van Gool L. Efficient non-maximum suppression // 18th International Conference on Pattern Recognition (ICPR'06). – IEEE, 2006. – Т. 3. – С. 850-855.

РАЗРАБОТКА ГОЛОСОВОГО ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКОГО ИНТЕРФЕЙСА ДЛЯ ТЕСТИРОВОЧНОГО ФРЕЙМВОРКА

С.А. Рудь, А.А. Рудь

Самарский университет, Самара, Россия

jin_.96@mail.ru

При тестировании приложения иногда требуется проверить определённый функционал без перезапуска фреймворка, таким образом выполнение динамических команд налету – очень удобная функция. Целью работы является разработка голосового пользовательского интерфейса для тестирования десктопных приложений в режиме реального времени. Для разработки использовался следующий стек технологий: язык программирования Python 3.9; FlaNium.WinAPI [1] в качестве драйвера для доступа к элементам управления тестируемого десктопного приложения; Vosk [2] для решения задачи автоматического распознавания текста (ASR).

Этапы общего алгоритма: аудиосигнал транслируется в текст посредством ASR-модели; текст нормализуется; вычлняются ключевые слова; формируется команда; выполняется команда. Особенностью тестирования десктопных приложений является узкая доменная область, что значительно облегчает разработку подсистем парсинга и выполнения команд. Чтобы полностью покрыть область возможных команд, был собран набор feature-файлов, содержащих тесты-кейсы для используемого фреймворка. По нему была собрана статистика частоты встречаемых слов, и составлен словарь ключевых слов. Ключевые слова разделены на типы: действие, объект, параметр – составляющие части атомарной команды. Алгоритмически из текста выделяются слова, согласно словарю и типам, после чего формировалась команда, которую драйвер выполняет.

Разработанный голосовой пользовательский интерфейс удовлетворяет требованиям качества транскрибации и работает в режиме реального времени. В качестве расширения функциональных возможностей системы намечена реализация распознавания команд на разных языках, таким образом будет доступна поддержка работы с приложениями разной локализации.

1. FlaNium.WinAPI – [Электронный ресурс] <https://github.com/lanit-exp/FlaNium.WinAPI> (дата обращения 07.11.2022).
2. Vosk Speech Recognition Toolkit – [Электронный ресурс] <https://alphacephei.com/vosk/> (дата обращения 07.11.2022).

GMRES С ОРТОГОНАЛЬНЫМИ ВЕКТОРАМИ НАПРАВЛЕНИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ С МНОГИМИ ПРАВЫМИ ЧАСТЯМИ

Д.А. Желтков^а, С.В. Сукманюк^б

^а *Институт Вычислительной Математики РАН, Москва, Россия*

^б *Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

s.sukman@yandex.ru

Естественной идеей итерационного метода решения систем является минимизация невязки на Крыловских пространствах. Есть два варианта реализации данной идеи. Один из них – метод сопряженных невязок (GCR)[1], на k -ой итерации которого требуется хранение базисов двух пространств: $K_k(A, b)$ и AK_k . GCR просто обобщается на случай многих правых частей. Другой вариант – обобщенный метод минимальных невязок (GMRES) [2], который строит уже ортонормированный базис Q_k как для $K_k(A, b)$, так и для его образа.

Ранее был предложен основанный на GMRES метод решения системы с многими правыми частями, в точной арифметике эквивалентный GCR. Векторы направлений выбирались как разности невязок на соседних итерациях.

В нашей работе мы предлагаем изменить выбор базиса пространства поиска решений так, чтобы он был ортонормированный, при этом явно его не хранить. Такой выбор базиса уменьшит число обусловленности треугольной матрицы, с которой на конечном шаге решается система, позволит более точно вычислять векторы q и оценивать норму невязки, а также решать системы с более высокими точностями.

Работа выполнена при поддержке проекта Российского научного фонда №19-11-00338-П.

1. Lingen F. J. A Generalised Conjugate Residual method for the solution of nonsymmetric systems of equations with multiple right-hand sides // International journal for numerical methods in engineering. – 1999. – Т. 44. – №. 5. – С. 641-656.
2. Saad Y., Schultz M. H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM Journal on scientific and statistical computing. – 1986. – Т. 7. – №. 3. – С. 856-869.

МОДЕРНИЗИРОВАННЫЙ БЛОК УПРАВЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРОЙ

Д.В. Гайворонский, Б.Ж. Умидхонов

*Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический Университет «ЛЭТИ» имени
В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

b.umidkhonov@mail.ru

1. Введение

На основе анализа рынка существующих систем измерения температуры предложено решение, обладающее более широким функционалом, меньшим энергопотреблением и компактными размерами.

2. Основная часть

Задача измерения температуры нашла широкое применение в системах контроля состояния помещения. Среди множества существующих на рынке решений, по критерию соответствия техническому заданию, отобраны два блока – ANENG и LPSECURITY. Общим недостатком является невозможность одновременного управления вентилятором, теплообменником, что важно при решении задач контроля температуры. За основу разработки было взято решение компании ООО «Санлайн-Строй». Достоинствами этого решения являются возможность управления вентилятором, два модуля измерения температуры, а недостатками – питание блока от сети 220 В, наличие модуля преобразователя напряжения, выполненного на дискретных компонентах, что становилось причиной частого выхода из строя отдельных компонентов, отсутствие дискретных входов и выходов и невозможность управления теплообменником.

Разработанный блок питается от внешней сети 24 В. Модуль преобразования напряжения оснащен защитными схемами от перефазировки питания и короткого замыкания. Блоком управляет микроконтроллер ATMEGA. Он, получив данные о температуре, обрабатывает их и принимает решение. Если температура превысит верхнее пороговое значение, в помещении включается вентиляция. Блок также оснащен модулями дискретного входа и выхода, которые используются для подключения и расширения возможных областей применения системы. Помимо этого, имеется модуль управления теплообменником, поддерживающий температуру на необходимом уровне.

3. Заключение

Разработанный блок показывает высокую эффективность, стабильность параметров и низкое энергопотребление в сравнении с решениями, представленными на рынке.

МЕТОД УСЕЧЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ВОЛНОВОДНОЙ СТРУКТУРЕ

А.Э. Шипило, К.А. Романов

Институт Вычислительной Математики и Информационных Технологий, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия,

shadowfire-1@mail.ru, kirilinka320@gmail.com

Рассматривается двумерная задача дифракции ТЕ-поляризованной электромагнитной волны в полубесконечной прямоугольной волноводной структуре с резонансной областью в конце (рис. 1).

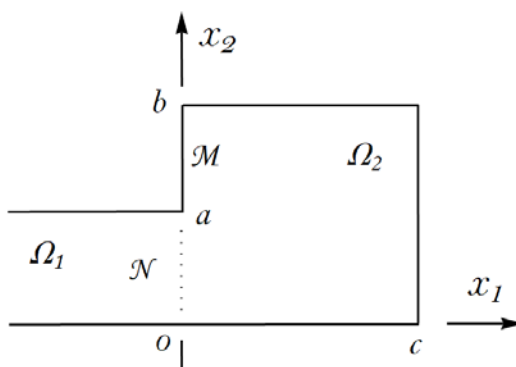


Рисунок 1 – Полубесконечная волноводная структура.

Как известно [1], данную задачу с помощью метода частных областей можно свести к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений

$$\sum_j a_{k,j} u_j = y_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (1)$$

относительно коэффициентов u_j разложения потенциальной функции $u(x)$, $x = (x_1, x_2)$, в ряд по собственным функциям резонансной области Ω_2 .

В настоящей работе исследуются вопросы обоснования метода усечения, применяемого для приближенного решения системы (1). Проверяется условие

$$\sum_k \sum_j |a_{k,j}|^2 < +\infty,$$

при котором последовательность приближенных решений БСЛАУ (1) S-сходится к точному решению.

1. Abgaryan G.V., Pleshchinskii N.B. On the eigen frequencies of rectangular resonator with a hole in the wall // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2019. – Vol. 40, Is. 10. – P. 1631-1639.

**СЕКЦИЯ 6 ДИЗАЙН, СИНТЕЗ И
ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ,
МЕЗО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ**

РАЗРАБОТКА ТЕРМОУПРАВЛЯЕМОГО СВЕТОДИОДА НА ОСНОВЕ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ГАЛОИДНЫХ ПЕРОВСКИТОВ

Э.И. Батталова, С.С. Харинцев

Кафедра оптики и нанофотоники, Институт физики КФУ, Казань, Россия

eibattalova@stud.kpfu.ru

Неорганические галоидные перовскиты – это семейство материалов с уникальными оптоэлектронными свойствами, одним из которых является высокий квантовый выход фотолюминесценции [1]. Цель настоящей работы заключается в генерации нового состояния перовскитов, позволяющего перестраивать длину волны фотолюминесценции в широком диапазоне. Для решения этой задачи предложен оригинальный способ локального фотонагрева с помощью термоплазменной метаповерхности. Термоплазменная метаповерхность представляет собой двумерный массив наноразмерных TiN:Si структур, которые разогреваются под действием падающего света и играют роль локальных тепловых источников [2]. Температура источников регулируется высотой кремниевого волновода и может изменяться в пределах от нескольких до тысяч градусов Цельсия. Помещая нано- и микрокристаллы перовскитов на такие локализованные источники тепла, можно создавать субволновые температурные профили [2]. Это позволяет управлять дисперсией ширины запрещённой зоны перовскитов [3]. При освещении лазерным светом каждый источник тепла может излучать свет с разной длиной волны.

Для реализации предложенного подхода синтезированы микрокристаллы неорганических перовскитов CsPbBr₃. Физико-химические свойства синтезированных микрокристаллов исследованы методами конфокальной оптической микроскопии, времяразрешённой флуоресцентной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света.

1. Akkerman Q.A. et al. Genesis, challenges and opportunities for colloidal lead halide perovskite nanocrystals // Nat. Mat. 2018. V.17. P.394-405.
2. Kharintsev S.S. et al. Designing two-dimensional temperature profiles using tunable thermoplasmonics // Nanoscale 2022. V.14. P.12117.
3. Mannino G. et al. Temperature-dependent optical band gap in CsPbBr₃, MAPbBr₃, and FAPbBr₃ single crystals // J. Phys. Chem. Lett. 2020. V.11. P.2490-2496.

КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЦИКЛИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ЭЛЕКТРОДОВ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК

И.Ю. Богуш, Н.К. Плуготаренко

Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

inlys@sfedu.ru

Суперконденсаторы в качестве объектов исследований продолжают привлекать внимание многих исследователей, занимающихся в области альтернативных источников энергии. В связи с этим, как перспективный электродный материал привлекают кремний-углеродные пленки (КУП), которые обладают уникальными свойствами, такими как твердость, химическая инертность, низким коэффициентом трения и термической стабильностью [1].

Для исследования были синтезированы КУП без легирования и КУП легированные никелем и марганцем, нанесенные методом электрохимического осаждения из растворов на основе метанола и гексаметилдисилазана на медную подложку [2]. Целью данной работы было исследование стабильности электродов суперконденсаторов на основе кремний-углеродных пленок.

Для определения стабильности электродов суперконденсаторов был проведен комплекс исследований методами циклической вольтамперометрии (ЦВА), гальваностатического заряда-разряда и электрохимической импедансной спектроскопии (ЭИС). Испытания методами ЦВА и гальваностатического заряда-разряда показали, что наиболее стабильный образец на основе Ni-содержащих КУП. Удельная емкость для всех «Чистых» и Ni-содержащих электродов стабилизировалась примерно после 150 циклов заряд-разряда. Для Mn-содержащих КУП наблюдалось увеличение удельной емкости на 30 %. Сохранение удельной емкости для КУП без легирования, Mn-содержащих и Ni-содержащих КУП в течении 450 циклов составила 97%, 93% и 99% соответственно. Измерения ЭИС показали, что изменение сопротивления на границе электрод/электролит было не более 2% в течение всех циклов, это указывает на то, что структура КУП не была нарушена.

Таким образом, результаты исследования стабильности являются удовлетворительными, показывая, что синтезированные КУП обладают большим потенциалом для разработки электродов суперконденсаторов.

Исследование выполнено при поддержке Программы стратегического академического лидерства Южного федерального университета ("Приоритет 2030").

1. H. Zhuang, N. Yang, L. Zhang, R. Fuchs, X. Jiang. ACS Appl. Mater. Interfaces, 2015, **7(20)**, 10886-10895.
2. Grigoryev, M. N.; Myasoedova, T. N.; Mikhailova, T. S. J. Phys. Conf. Ser. 2018, **1124**, 081043 (2018)

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДИМОСТИ НАНОКЛАСТЕРНЫХ СТРУКТУР ТЕЛЛУРИДА СВИНЦА

Д.Н. Бухаров

Владимирский государственный университет имени А.Г. и Н.Г. Столетовых, Владимир, Россия

buharovdn@gmail.com

Нанокластерные стурктуры на основе теллурида свинца (PbTe) являются перспективными материалами для использования в качестве новой элементной базы для производства современных электронных приборов [1]. Такие образцы были получены за счет управляемого лазерного на тонкую эпитакциальную пленку PbTe [2]. В образцах сформировалась система дендритных нанокластеров с размерами от 50 нм до 1 мкм и высотами до 40 нм, зависящими от мощности излучения и времени воздействия. Вольт-амперные характеристики (ВАХ), измеренные 4-точечным методом для напряжений (0; 1) В оказались прямо пропорциональны поверхностной плотности нанокластеров. Наблюдалось усиление ВАХ на 50% для напряжений [0,5;0,6]В. Резистометрия при температурах [20; 100]⁰С выявила переход электропроводимости от туннельной к прыжковой при 85⁰С. Моделирование структуры образцов в приближении диффузионно-ограниченной агрегации [2] и их ВАХ на основе закона Ома и прыжковой модели позволило произвести калибровку параметров эксперимента для получения образцов с требуемыми свойствами. Таким образом, усиление электропроводимости с возможностью эффективного преобразования тепловой энергии в электрическую в области средних температур открывает перспективы создания инновационной элементной базы для электронных устройств с термоэлектрическими модулями: холодильники, приборы освещения, зарядные устройства, автомобильные генераторы и т.д.

1. Yeshiyuan Zhou 2022 J. Phys.: Conf. Ser. **2194** 01200
2. D N Bukharov et al 2022 J. Phys.: Conf. Ser. **2316** 012013

СОЗДАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ НА ОСНОВЕ МЕТАКРИЛОВЫХ СОПОЛИМЕРОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ХРОМОФОРНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ В БОКОВОЙ ЦЕПИ

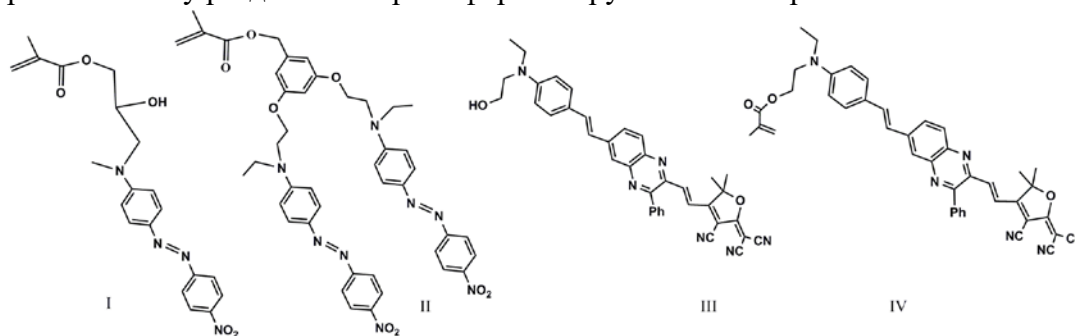
А.И. Гайсин^а, Т.А. Вахонина^а, Г.М. Фазлеева^а, А.А. Калинин^а, А.Г. Шмелев^{а,б},
Л.Н. Исламова^а, О.Д. Фоминых^а, А.Ш. Мухтаров^а, А.Р. Хаматгалимов^а, М.Ю. Балакина^а

^а Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

^б Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

adelgaysin@ya.ru

Проведены исследования эффективности разных подходов к созданию полимерных материалов, характеризующихся высокими значениями и долговременной релаксационной стабильностью квадратичной нелинейно оптической (НЛО) активности. Методом радикальной полимеризации метилметакрилата (ММА) и мономеров **I** или **II** синтезированы сополимеры с различным содержанием азо-хромофорных фрагментов. На основе полученных сополимеров изготовлены тонкие однородные пленки, и определены НЛО характеристики полученных материалов. Метакриловые сополимеры, содержащие би-хромофорные фрагменты, показали более высокие значения НЛО коэффициента по сравнению с полимерами, содержащими одинарные хромофоры. Установлено, что увеличение концентрации би-хромофорных фрагментов в сополимере до ~40 масс% приводит к росту НЛО коэффициентов, благодаря пространственному разделению хромофорных групп в мономере.



Впервые получены метакриловые полимеры, содержащие в боковой цепи дипольные хромофоры с хиноксалиновым фрагментом в пи-электронном мостике (**III**, **IV**), и изучена их НЛО активность. Такие хромофоры характеризуются высокими значениями дипольного момента и первой гиперполяризуемости по сравнению с азо-хромофорами. Сополимеры получали двумя способами: функционализацией сополимеров ММА-МАК хромофором **III** с использованием реакции этерификации и радикальной сополимеризацией ММА с мономером **IV**. Сополимеры, полученные вторым способом, характеризуются заметно более высокими значениями НЛО коэффициентов. Синтезированные полимеры показали хорошую временную и термическую стабильность НЛО отклика.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ; проект № 21-13-00206.

МАГНЕТРОННЫЕ СВОЙСТВА РАДИОЛАМП

В.С. Глушкова

ФГБОУ НИУ МАИ, МБОУ «СОШ №12», Королёв, Московская область, Россия

Lera.Glushkova.08.ru

Магнетрон – это электронно-вакуумная лампа, в которой управление током происходит с помощью магнитного поля. История магнетрона началась более ста лет назад, но особенное развитие этого направления произошло с появлением высокочастотной техники [1]. В настоящее время исследования продолжаются, в том числе в поиске новых форм электронных пучков, например, не лучевых, а плоских [2]. Это нужно для развития сверхвысокочастотной техники, в том числе бытовых СВЧ-печей. Цель этой работы заключается не в создании нового прибора, а в оценке скрытых свойств созданных и выпускаемых промышленностью радиоламп. Практическое применение результатов позволит ввести новые каналы управления в электронные схемы. Дополнительно решается задача лабораторного обеспечения учебного процесса при изучении электродинамики. Работа началась с простого опыта. К мощной радиолампе ГУ-81М в штатном режиме работы, с маленьким анодным напряжением (12 В вместо 1500-3000 В), подносили сильный неодимовый магнит. При этом ток анода уменьшался вследствие закрутки электронов между катодом и анодом. Затем лампа была помещена в соленоид для более детального изучения этого явления. Другой опыт заключался в оценке силы тока термоэлектронной эмиссии. Этим током тоже можно управлять посредством магнитного поля. Это важно для систем управления термоэмиссионными преобразователями. Второй лампой, выбранной для исследования, стал, напротив, маломощный миниатюрный триод 6СББ-В, который без труда размещается в соленоиде диаметром 3 см. Для него была определена зависимость анодного тока от магнитного поля. Для обеих радиоламп доказаны новые возможности управления приборами.

1. Перпя Я. З. Как работает радиолокатор. Оборонгиз, 1955.
2. Лобанов М.М. Расширение исследований по радиолокационному обнаружению. Развитие советской радиолокационной техники. – 2016. Электронный ресурс: http://hist.rloc.ru/lobanov/1_07.htm

ИЗМЕНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ОЦК-КРИСТАЛЛА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

А.Н. Гостевская^a, А.В. Маркидонов^b

^a *Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия*

^b *Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, Новокузнецк, Россия*

lokon1296@mail.ru

В ходе процесса термического воздействия необходимо понимать следующее: данным процессом является изменение микроструктуры металла, при воздействии на него температурны, в результате чего формируются физико-химические свойств металла [1]. Метод компьютерного моделирования дает возможность виртуального проведения эксперимента, при котором возможно не только создавать, но и развивать сложную систему в виртуальной среде без затрат.

В прямоугольной системе координат размер вычислительной единицы находится в трех ортогональных кристаллографических направлениях, совпадающих с осью. Далее формируется базовая ячейка, формируется массив частиц, соответствующий ОЦК-решетке, и его трансляция заполняет весь заданный объем. В данном исследовании функция межчастичного взаимодействия применялся потенциал. Расчеты выполняются в пакете XMD и визуализировались с помощью пакета визуализации OVITO [2].

Процесс моделирования состоял из двух этапов. На начальном этапе расчетная ячейка подвергалась неравномерному нагреву в течение 10 пс модельного времени. После чего следовал второй этап, заключающийся в неравномерном охлаждении в течение 20 пс, при котором температура расчетной ячейки. После того как локальная температура расчетной ячейки на этапе нагрева начинает превышать температуру плавления происходит фазовый переход и в ячейке формируется граница раздела твердой и жидкой фазы. Последующее повышение температуры приводит к, отслоению частиц. Этап охлаждения сопровождается локализацией областей разряджения, сформированных на предыдущем этап нагрева, их коалесценцией и образованием сферических пор. Следует отметить, что пустоты, образовавшиеся в ячейках при моделировании, исчезают при $q \leq 3,5$ МВт/см². Такого рода недостатки подлежат дальнейшему проведению исследований.

Быстропротекающие процессы в твердых телах на сегодняшний день успешно изучаются с помощью методов компьютерного моделирования. Было обнаружено, что в поверхностном слое после прекращения внешнего воздействия свободный объем локализуется в виде группы пор, которые растворяются в процессе усадки. Стабилизировать данные поры можно путем увеличения скорости охлаждения расчетной ячейки.

Работа выполнена в рамках государственного задания: 0809-2021-0013.

1. Маркидонов А.В., Гостевская А.Н., Громов В.Е., Старостенков М.Д., Зыков П.А. Моделирование структурных изменений в поверхностном слое деформированного ОЦК-кристалла при кратковременном внешнем высокоинтенсивном воздействии // Деформация и разрушение материалов. 2022. № 8. С. 2-8.
2. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation Materials Science and Engineering. 2010. V.18. 015012.

ВЛИЯНИЕ ТИТАНА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА НАПЛАВЛЕННОГО МЕТАЛЛА ПОРОШКОВЫМИ ПРОВОЛОКАМИ СИСТЕМЫ FE-C-SI-MN-CR-NI-MO

В.К. Дробышев, А.А. Комаров, А.Р. Михно, В.А. Романова

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

drobyshev_v.k@mail.com

В работе представлено исследование по разработке новых составов порошковых проволок, используемых для наплавки изделий, работающих в условиях абразивного износа промышленной металлургии [1], в частности изучение влияния введения в порошковые проволоки углеродфторсодержащих компонентов, а также введения в состав порошка титана на степень износа и твердости наплавленного слоя.

Наплавка исследуемых образцов выполнялась на следующих режимах: сила тока 500А, напряжение 28В, скорость наплавки 15 см/мин. В качестве флюса использовался ранее разработанный флюс, изготовленный из техногенного сырья производства [2].

Исследование образцов наплавленного слоя на загрязненность неметаллическими включениями, показало, что в образцах преимущественно наблюдаются оксиды. Для всех исследуемых образцов отмечена незначительная загрязненность неметаллическими включениями, не оказывающая негативное влияние на свойства наплавленного слоя и допустима для использования исследуемой порошковой проволоки. Микроструктура наплавленного металла имеет в основном дендритное строение и представляет собой мелкоигльчатый и среднеигльчатый мартенсит (балл 3-7) с размером игл (3 – 7) мкм, сформировавшийся внутри границ бывшего зерна аустенита, небольшое количество аустенита остаточного в виде отдельных участков и тонкие прослойки δ -феррита.

По полученным данным химического состава и физико-механических свойств наплавленного металла, были построены регрессионные зависимости влияния химических элементов на степень износа и твердость наплавленного слоя исследуемыми порошковыми проволоками.

На основании исследований установлено, что введение и увеличение содержания порошка титана повышает прочность и твердость наплавленного слоя, способствует измельчению зерна за счёт образования новых центров кристаллизации, улучшает износостойкость при абразивном изнашивании.

Работа выполнена в рамках государственного задания: 0809-2021-0013

1. D.V. Slinko, R.Yu.Solovev, A.B.Kaveshnik. Experience in the use of plasmapowder surfacing in the reduction of the semi-axes stages subway escalators. Trudy GOSNITI – Moscow. 2015 Vol. 121. p. 243 – 249.
2. Влияние введения в шихту для производства порошковой проволоки системы C-Si-Mn-Cr-V-Mo углеродфторсодержащей добавки и никеля / Н. А. Козырев, Д. А. Титов, С. Н. Старовацкая, О. Е. Козырева, В. М. Шурупов // Известия вузов. Черная металлургия. – 2014. – № 4. – С. 34–37.

СОЗДАНИЕ НЕИОНОГЕННОГО ПАВ С ДЕНДРИДОПОДОБНОЙ СТРУКТУРОЙ ДЛЯ ИНГИБИТИРОВАНИЯ БИОКОРРОЗИИ БАКТЕРИЙ

А.В. Ердякова, П. Замковая, А.А. Ханнанов, М.П. Кутырева

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Yerdyakova02@mail.ru

Сульфатовосстанавливающие бактерии (СВБ) являются одними из наиболее активных бактерий, вызывающих биокоррозию. Эти анаэробные бактерии способны долгое время сохранять жизнеспособность и в отсутствии кислорода. В результате жизнедеятельности сульфатовосстанавливающие бактерии продуцируют продукты, приводящие к электрохимической коррозии.

Классический способ защиты от биокоррозии – обработка бактериостатическим и бактерицидным веществами, – не эффективен во многих технологических процессах нефтегазовой промышленности. Поверхностно-активные вещества (ПАВ) давно и широко применяются для стабилизации нефти при хранении и транспортировке. Хорошим вариантом развития данной темы является получение нового неионогенного ПАВ, структура которого будет представлять собой ветвь сверхразветвленного полимера (СРП), обладающего ингибиторными свойствами.

В последние годы применение СРП в поверхностно-активных веществах постепенно привлекает внимание многих исследователей. СРП имеет много преимуществ, таких как трехмерная структура, многоконцевые функциональные группы и высокая реакционная активность.

Создание гибридных систем на основе сверхразветвленного ПАВ позволит сочетать функциональные свойства СРП и ПАВ. На рисунке 1 представлена методика синтеза сверхразветвленного поверхностно активного вещества на основе 2,2-бис(гидроксиметил)пропионовой кислоты в качестве гидрофильного фрагмента и додеканола в качестве гидрофобного хвоста.

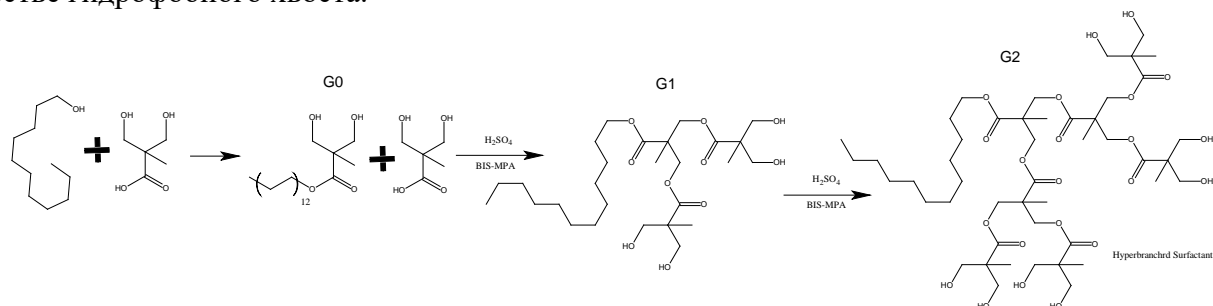


Рисунок 1 – Схема синтеза СРП-ПАВ.

Нашей целью является создание экологически чистого, нетоксичного, неподдающегося разложению и хорошо растворимого в воде гибрида сверхразветвленного полимера и ПАВ. На текущий момент синтезированы, охарактеризованы и доказаны строения соединений G0 и G1. Ведется отработка синтеза соединения G2.

ОПТИЧЕСКИЙ НАГРЕВ КРЕМНИЕВЫХ АСМ КАНТИЛЕВЕРОВ

Э.А. Избасарова, С.С. Харинцев

КФУ, Институт физики, Казань, Россия

Izbasarova.E.A@mail.ru

В последнее время большую актуальность приобретает развитие методов термонанопластики, которая позволяет реализовать высокоэффективный оптический нагрев наноструктур, а также измерить их температуру. Подобные технологии используются в широком спектре прикладных задач, например: фототермическая терапия рака [1], детектирование локальных фазовых переходов [2], термо-ассистируемая магнитная запись информации, биомедицина и аналоговые вычисления. Одной из ключевых проблем в этой области являются усиление эффективности фототермического преобразования и пространственной локализации тепла.

Настоящая работа посвящена разработке механизмов локального фотонагрева и контроля температуры в режиме реального времени. Для этих целей исследуется оптический нагрев кончиков кремниевых кантилеверов, которые широко используются в атомно силовой зондовой микроскопии. Для анализа механизмов такого аномального фотонагрева в работе выполнено численное моделирование. Первый шаг заключался в расчете поглощенной мощности и исследовании электромагнитных мод, возбуждаемых в кончике зонда, с помощью метода конечных разностей во временной области (FDTD). Далее численно решалось уравнение тепловой диффузии для расчета температуры нагрева зонда методом конечных элементов (FEM). Теоретически показано, что острие кремниевого зонда разогревается до 1200K при его освещении лазерным светом с интенсивностью 5 МВт/см² на длине волны 633нм. Это аномальное поглощение света связано с возбуждением локализованного плазмонного резонанса на кончике наноантенны. В этой работе повышение температуры кончика кремниевого АСМ кантилевера при сфокусированном на нём лазерном излучении измерялось с помощью термометрии комбинационного рассеяния света. Экспериментально доказано с помощью изменения фазы колебаний кантилевера, появления сдвига рамановских линий и сканирующей электронной микроскопии, что происходит гигантский нагрев кремниевого зонда. В будущем полученные результаты будут использованы для разработки методов детектирования фазовых переходов в сильно неоднородных материалах с нанометровым пространственным разрешением.

1. Bucharskaya A. et al. Towards effective photothermal/photodynamic treatment using plasmonic gold nanoparticles. – 2016. – Т. 17. – №. 8. – С. 1295.
2. Vasudevan R. K. et al. Acoustic detection of phase transitions at the nanoscale. – 2016. – Т. 26. – №. 4. – С. 478-486.

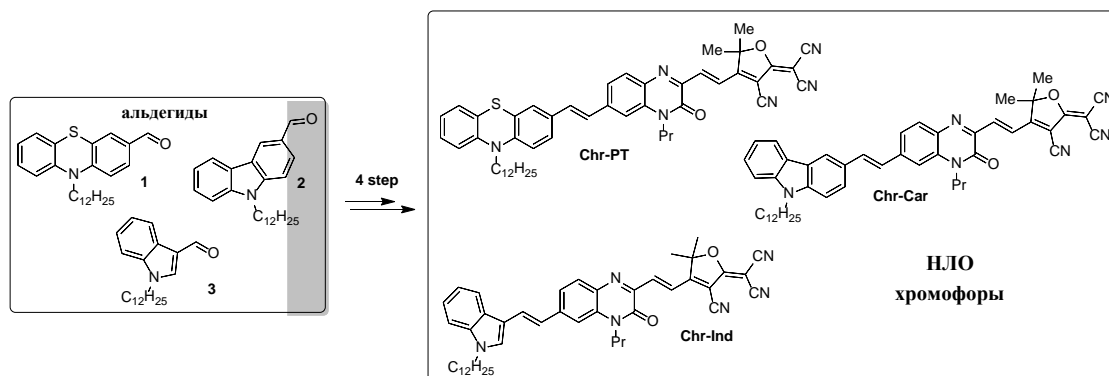
НОВЫЕ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ ХИНОКСАЛИНОВЫЕ ХРОМОФОРЫ С ГЕТЕРОАРИЛЬНЫМИ ДОНОРНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: СИНТЕЗ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Л.Н. Исламова, А.И. Гайсин, П.В. Лебедева, Г.М. Фазлеева, С.М. Шарипова,
А.А. Калинин, О.Д. Фоминых, М.Ю. Балакина

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр
РАН, Казань, Россия

nailislil1989@mail.ru

Органические хромофоры являются молекулярными источниками квадратичной нелинейно-оптической (НЛО) активности полимерных материалов, применяемых для создания оптоэлектронных устройств. В данной работе мы представляем синтез и комплексное исследование новых перспективных НЛО хромофоров [1]. Хромофоры синтезированы на основе гетероциклических альдегидов (**1-3**) в несколько стадий, при этом для повышения растворимости как в растворе, так и в полимерной пленке были получены производные с додецильным заместителем.



Были систематически исследованы фото-физические свойства красителей, для которых характерен интенсивный максимум поглощения в видимой области: 594 нм (**Chr-PT**), 584 нм (**Chr-Car**), 612 нм (**Chr-Ind**) в электронном спектре. Изучено влияния донорного фрагмента на значения первой гиперполяризуемости – молекулярной нелинейно-оптической характеристики, которая согласно DFT расчетам на уровне M06-2X/aug-cc-pVDZ//B3LYP/6-31G(d) составила 806, 696, 641 $\times 10^{-30}$ ед. СГСЭ, соответственно для **Chr-PT**, **Chr-Car**, **Chr-Ind**. В докладе обсуждаются НЛО свойства композиционных полимерных материалов, допированных рассматриваемыми хромофорами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 21-73-00060.

1. Islamova L.N., Kalinin A.A., Gaysin A.I., Fazleeva G.M., ..., Balakina M.Yu., *J. Photochem. Photobiol.*, A., 2022, 431, 114013.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ОГРАНИЧЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ МЕТОДОМ ТЕРМОМЕТРИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

А.В. Казанцева, С.С. Харинцев

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

nastyakazantseva13@gmail.com

Методом позволяющим создавать трёхмерные микроструктуры различного архитектурного дизайна с поразительной точностью является двухфотонная полимеризация прямой лазерной записи (ДФП) [1]. Однако при создании ДФП наноструктур для чипов и сенсоров возникает проблема прогнозирования их физико-химических свойств. Причина в размерных эффектах: изменении температуры плавления и стеклования, вступающих в силу при ограничении объекта в одной или двух плоскостях до размеров молекулы. Данный эффект хорошо изучен на 1D пространственно-ограниченных полимерных объектах [2]. Мы поставили перед собой задачу исследовать 2D ограниченные в пространстве полимерные структуры похожие на стенки транспортных каналов микрофлюидных чипов. Спектры комбинационного рассеяния света были получены с помощью многоцелевого аналитического прибора NTEGRA SPECTRA™ в вертикальной конфигурации. Спектры комбинационного рассеяния света в диапазоне 200-2000 см^{-1} регистрировались со спектральным разрешением 1,3 см^{-1} с использованием решетки 600 мм^{-1} . Массив полимерных наноструктур был помещен на нагревательную ступень, работающую в диапазоне 20-150 $^{\circ}\text{C}$. Методом термометрии комбинационного рассеяния света была установлена температура стеклования полимерной наноструктуры (90-100 $^{\circ}\text{C}$) и олигомерной подложки (65 $^{\circ}\text{C}$). Экспериментальные данные свидетельствуют о росте температуры стеклования в результате полимеризации материала. А также, если сравнить температуру стеклования нанодорожки и макрообразца того же материала полученную методом калориметрии (456 $^{\circ}\text{C}$), то можно сделать вывод, что в результате увеличения соотношения поверхности к объёму стеклообразный переход происходит при меньшей температуре.

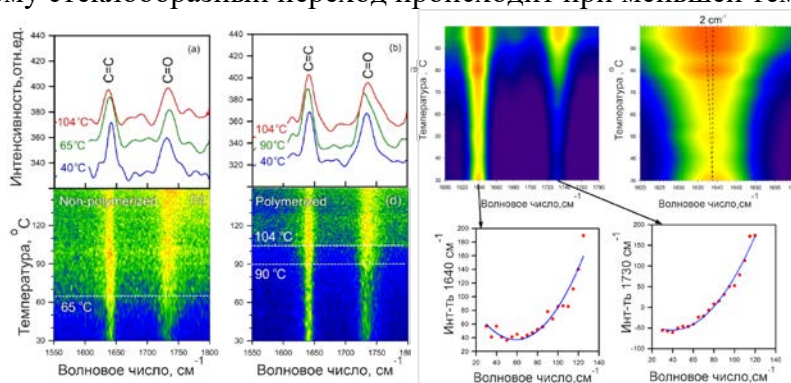


Рисунок 1 – Карты КР олигомера и полимера в зависимости от температуры нагрева образца.

Таким образом, проведена характеристика локальных термохимических свойств ДФП микроструктуры методом термометрии КР. Результаты данной работы прокладывают путь к лучшему пониманию процессов фотополимеризации на наномасштабе.

1. Maruo S, Fourkas J T Recent progress in multiphoton microfabrication // Laser Photonics Rev. 2008. №2. 100-111.
2. Liem H. et al. Glass transition temperatures of polymer thin films monitored by Raman scattering // Journal of physics: condensed matter. 2004. №16. 721-728.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ИОДИДА МЕДИ С 10-(ПАРАФТОРФЕНИЛ)ФЕНОКСАРСИНОМ - НОВОГО ПЕРСПЕКТИВНОГО ЛЮМИНЕСЦЕНТНОГО МАТЕРИАЛА СО СВЕЧЕНИЕМ В "ЗЕЛеноЙ" ОБЛАСТИ СПЕКТРА

А.Д. Колоколова^a, А.Б. Добрынин^{a,b}

^a Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева - КАИ, Казань, Россия

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

colocolova@gmail.com

Методом рентгеноструктурного анализа были исследованы два комплекса иодида меди с 10-(парафторфенил)феноксарсином. В одном случае образуется комплекс с иодидом меди Cu_2I_2 (Рис.1), а в другом случае – с иодидом меди Cu_4I_4 (Рис.2).

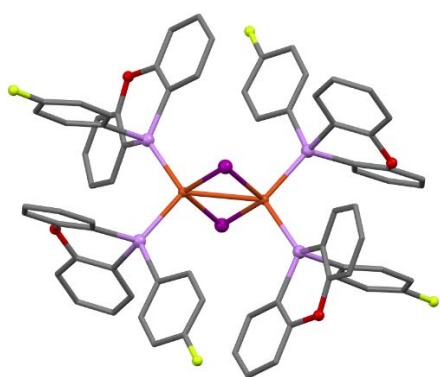


Рисунок 1

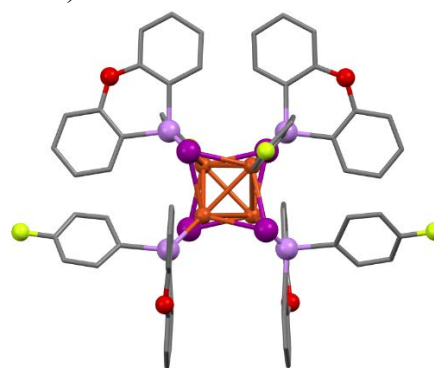


Рисунок 2

Комплекс 10-(парафторфенил)феноксарсина с иодидом меди Cu_4I_4 обладает люминесцентными свойствами со свечением в «зеленой» области спектра.

В данной работе были исследованы молекулярные и кристаллические структуры данных комплексов и выяснены вероятные причины люминесценции только в комплексе с иодидом меди Cu_4I_4 .

ВЗАИМОСВЯЗЬ СТРУКТУРЫ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ С СУЛЬФОБЕТАИНОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: САМОСБОРКА И ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ В ОТНОШЕНИИ ЛИНИЙ РАКОВЫХ КЛЕТОК

А.Ф. Кунафина, Л.С. Якимова, П.Л. Падня, И.И. Стойков

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

ais.kunaf@yandex.ru

Одним из актуальных и важных направлений развития супрамолекулярной химии является выявление взаимосвязи структура–биологическая активность, которая в свою очередь оказывает влияние на практическое применение синтезируемых молекул. В качестве соединений с регулируемой способностью к самосборке и, соответственно, с регулируемой цитотоксичностью, можно использовать синтетические макроциклические платформы – (тия)каликс[4]арены. Благодаря способности фиксировать макроциклическое кольцо в нескольких конформациях и относительной простоте целенаправленной функционализации макроциклической платформы, функциональные группы могут располагаться в пространстве заданным образом.

В данной работе синтезированы сульфобетаиновые производные тиакаликс[4]арена в трех конформациях. В присутствии Ag^+ эти производные способны к самосборке в ассоциаты с различной архитектурой (формой) и, как следствие, с цитотоксической селективностью по отношению к клеточной линии карциномы шейки матки.

Методом динамического светорассеяния показано, что синтезированные макроциклы в конформациях *конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат* образуют частицы субмикронного размера с Ag^+ в воде, но размер частиц и полидисперсность исследованных систем зависят от конформации макроцикла. Тип координации определяет различные формы ассоциатов (сферические и вытяженные). Показано, что цитотоксические свойства контролируются формой ассоциатов, при этом наибольшую активность проявляют тиакаликс[4]арены в конформации *частичный конус*.

Полученные результаты открывают новые возможности для создания новых систем адресной доставки в биомедицине.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 18-73-10094, <https://rscf.ru/project/18-73-10094/>.

ПРИМЕНЕНИЕ СУБМИКРОННЫХ ВОЛОКОН ОКСИДА НИКЕЛЯ В КАЧЕСТВЕ АКТИВНОГО ЭЛЕМЕНТА РЕЗИСТИВНОГО СЕНСОРА ДИОКСИДА АЗОТА

Э.М. Лебедева, Г.Р. Низамеева, Р.Р. Гайнуллин, И.Р. Низамеев

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

elgina.lebed@mail.ru

Проблемы защиты окружающей среды от токсичных газов, выделяемых в процессе сельскохозяйственной и промышленной деятельности, при сжигании органического топлива, становятся все более актуальными. Особое внимание уделяется проблеме загрязнения атмосферного воздуха оксидами азота. В связи с этим, своевременное обнаружение оксидов азота в воздухе является важной задачей. Эту задачу успешно решают сенсоры на основе структур оксидов различных металлов. Данная работа посвящена разработке сенсора на основе субмикронных волокон оксида никеля (NiO), которые способны обнаруживать диоксид азота. Волокна NiO были получены методом химического восстановления никеля из жидкой фазы в присутствии магнитного поля с последующей термообработкой в среде воздуха при температуре 600 °С. Синтезированные волокна оксида никеля NiO были исследованы методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Полученные результаты представлены на рисунке 1.

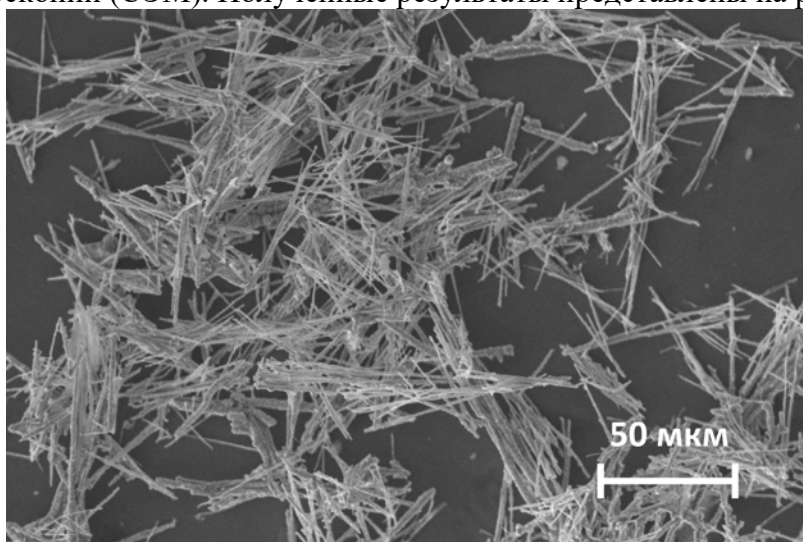


Рисунок 1 – СЭМ - изображение субмикронных волокон оксида никеля.

Установлено, что полученные структуры имеют игольчатую форму, длина которых от 20 до 100 мкм, толщина от 0,8 до 5 мкм.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

ХИНОКСАЛИНОВЫЕ ХРОМОФОРЫ Y-ТИПА – МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ИСТОЧНИКИ КВАДРАТИЧНОЙ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ КОМПОЗИЦИОННОГО ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

П.В. Лебедева^{a,b}, О.Д. Фоминых^a, А.И. Левицкая^a, М.Ю. Балакина^{a,b}

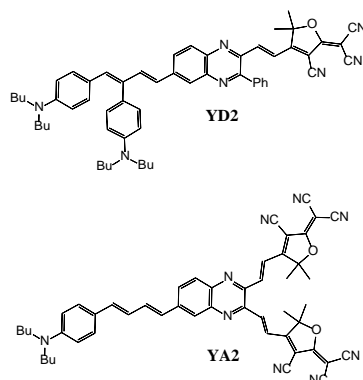
^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

^b Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ

p.lebedeva@yandex.ru

Полимерные материалы с высокой квадратичной нелинейно-оптической (НЛО) активностью необходимы при создании устройств для обработки, хранения и передачи информации. НЛО свойства этих материалов формируются на молекулярном уровне за счет введенных в полимерную матрицу органических хромофоров, характеризующихся большим дипольным моментом и первой гиперполяризуемостью. В настоящей работе

исследуется структура и свойства композиционного материала на основе ПММА, в котором гостями служат хромофоры Y-типа с двумя донорными/акцепторными фрагментами и дивинил хиноксалиновым мостиком. Структура хромофоров установлена методом DFT на уровне B3LYP/6-31G(d); электрические характеристики (дипольный момент, μ , и первая гиперполяризуемость, β_{tot}) рассчитаны на уровне M06-2X/aug-cc-pVDZ. Методом атомистического моделирования в аморфной ячейке [1] установлена структура материалов PMMA/YD2 и PMMA/YA2 с содержанием хромофоров 20 и 30 масс.%. Установлено, что хромофоры однородно распределены в полимерной матрице, при этом реализуются их агрегаты за счет π - π стекинговых взаимодействий, число которых практически не зависит от концентрации хромофоров.



Структуры хромофоров Y-типа

В ходе конформационного поиска определены наиболее вероятные конформации хромофоров-гостей, с помощью квантово-химического расчета оценены значения первой гиперполяризуемости: β_{tot} для Y-хромофоров D2 и A2 несколько выше, чем для родственного линейного хромофора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-13-00206).

1. Desmond Molecular Dynamics System, D.E. Shaw Research, New York, NY, 2021.

ОПТИЧЕСКИЙ НАГРЕВ ПЛАЗМОННОЙ НАНОСТРУКТУРЫ И ИЗМЕРЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА НАНОМАСШТАБЕ

В.М. Левковская, С.С. Харинцев, А.В. Харитонов

КФУ, Институт физики, Кафедра оптики и нанофотоники, Казань, Россия

levkovskaya.valeriya@gmail.com

В последнее время возрос интерес к изучению свойств материалов на наномасштабе. С уменьшением объекта до нанометрового размера изменяются его характеристики, и в ряде случаев появляются эффекты, не возникающие на макромасштабе. Например, в наночастицах из золота, серебра, нитрида титана и пр. под действием электромагнитного излучения возбуждается локализованный плазмонный резонанс, что ведет к их сильному нагреву[1]. Такие частицы выступают в роли локального источника тепла, способного разогреваться до сотен и тысяч градусов Кельвин при достаточно малых интенсивностях лазерной накачки. Интерес к такого рода нагревателям обусловлен рядом практических применений, среди них оптическая терапия рака [2] и фотокатализ [3]. Однако оптический нагрев наноструктуры не является сложной задачей, гораздо сложнее оказывается определить ее температуру [4]. Среди прочих методов измерения температуры выделяют рамановскую термометрию. Данная работа посвящена определению температуры наноструктуры, которая представляет собой кремниевый столбик с плазмонной наночастицей из нитрида титана. Мы предлагаем объяснение причины, по которой может возникать сильный и нелинейный нагрев нанообъектов при малых интенсивностях света.

1. Baffou G., Quidant R. Thermoplasmonics //World Scientific Handbook of Metamaterials and Plasmonics: Volume 4: Recent Progress in the Field of Nanoplasmonics. – 2018. – С. 379-407.
2. Baffou G., Cichos F., Quidant R. Applications and challenges of thermoplasmonics //Nature Materials. – 2020. – Т. 19. – №. 9. – С. 946-958
3. Dubi Y., Un I. W., Sivan Y. Thermal effects—an alternative mechanism for plasmon-assisted photocatalysis //Chemical science. – 2020. – Т. 11. – №. 19. – С. 5017-5027.
4. Baffou G. Anti-Stokes thermometry in nanoplasmonics //ACS Nano. – 2021. – Т. 15. – №. 4. – С. 5785-5792.

УСТОЙЧИВЫЕ УКЛАДКИ СТРОИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Т.А. Мерзликин

ФГБОУ НИУ МАИ, МБОУ «СОШ №12», Королёв, Московская область, Россия

t.merzlikin@bk.ru

Идея работы появилась после изучения конструкции куполов храмов и горловин русских печей [1]. Там применяют арки. Но арка всегда имеет распирающие напряжения. Арку всегда надо укреплять контраркой. Можно ли обойтись без контрарки? Оказалось, можно [2]. В физике известна задача об укладке кирпичей без дополнительного крепления. Требуется уложить кирпичи один на другой с максимальными выступами, но так, чтобы общая сборка не обрушилась. Какие выступы допустимы? Решение задачи было выполнено сначала экспериментально, а потом теоретически. Методика решения задачи следующая. Бруски нумеруются сверху вниз. Первый брусок укладывается на второй. Выступать он может на половину длины, чтобы центр тяжести был на опоре второго бруска. Потом два бруска укладываются на третий, измеряется длина и вычисляется доля выступа второго бруска. И так далее для пятнадцати брусков, пока шестнадцатый не оказался в фундаменте. Сразу стала видна форма строительной сборки. Опытные данные были представлены в виде числового массива в табличном редакторе Excel. Точность эксперимента равна 3 мм при длине брусков 300 мм, то есть 1% по длине. Новая арка отличается от классической архитектуры. В ней нет распирающих напряжений. Значит, не нужна контрарка. Арка устойчива сама по себе, лежит под собственным весом, как Египетские пирамиды. Перспектива работы заключается в проектировании устойчивого купола из частей секторов круга. Первые опыты доказали правильность гипотезы. Метод проектирования тот же, только изменилось положение центра масс верхнего блока – не в середине прямоугольника а на трети медианы треугольника. Следующие блоки выполнены в виде усечённых круговых секторов или трапеций. Устойчивые укладки собираются по круговым секторам, прилегают друг к другу, образуют единый купол, трёхмерную сборку.

1. Боголюбов А.Н. Гаспар Монж, 1746-1818. – М.: Наука, 1978. – 184 с.

2. Тимофей Мерзликин. Устойчивые строительные сборки. 09.02.2022. Электронный ресурс (видеоролик 6:12): <https://youtu.be/hPPX5vYfAqM>

КОМПОЗИЦИИ АБС ПЛАСТИКА С НЕФТЯНЫМИ АСФАЛЬТЕНАМИ КАК ЭЛЕКТРЕТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

А.М. Минзагирова^{a,b}, Ю.Ю. Борисова^a, Д.Н. Борисов^a, М.Ф. Галиханов^b

^a ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

^b Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

alsu.minzagirova@mail.ru

Полимерные электреты находят широкое применение в электромеханических устройствах из-за малого веса, большой квазипьезоэлектрической чувствительности. Для электрета на поверхности существует постоянное и макроскопическое электрическое поле, главным образом обусловленное макроскопическим электростатическим зарядом на поверхности или общей ориентацией полярных групп внутри объекта. Так как электрет – это диэлектрик, обладающий свойством сохранять электрическую поляризацию в течение длительного времени, в качестве матрицы был исследован непроводящий АБС-пластик [1].

Ключевым фактором, влияющим на свойства полимерных электретов, является плотность и стабильность зарядов, хранящихся на электретном слое или в нем. Добавление различных дисперсных наполнителей, в полимерную матрицу, способствует повышению и лучшей стабилизации электретных характеристик [2]. Хорошо зарекомендовавшими себя наполнителями, с точки зрения экономических и эксплуатационных преимуществ, являются нефтяные асфальтены и их модифицированные серной кислотой производные [3]. Асфальтены и их сульфированные производные были использованы в качестве наполнителей АБС в количестве 2,5; 5; 7,5% масс. Введение наполнителей привело к значительному повышению показателя потенциала поверхности (E , кВ) относительно ненаполненного образца АБС. Наибольшее изменение E , на 35-ые сутки измерения, наблюдалось при максимальном наполнении полимера: асфальтенами (7,5 % масс.) – повышение E с 0,161 кВ до 0,479 кВ; сульфированными асфальтенами (7,5 % масс.) – повышение E с 0,161 кВ до 0,511 кВ.

Таким образом, композиции на основе АБС пластика и асфальтенов или их модифицированных производных, являются перспективным материалом для создания электретов.

1. Migahed M. D. et al. TSDC spectra in negatively corona charged ABS electrets //Polymer Bulletin. – 1990. – Т. 23. – №. 1. – С. 61-66.
2. Галиханов М. Ф., Дебердеев Р. Я. Полимерные короноэлектреты: Традиционные и новые технологии и области применения //Вестник Казанского технологического университета. – 2010. – №. 4. – С. 45-57.
3. Minzagirova, A. M., Gilmanova, A. R., Borisova, Y. Y., Borisov, D. N., Galikhanov, M. F., Ziganshin, M. A., Yakubov, M. R. Polyolefin composition materials filled with oil asphaltenes and their functionalized derivatives // Journal of Siberian Federal University. Chemistry. – 2020. – V. 13, №3. – P. 408-417.

ШИРОКОПОЛОСНЫЕ ПЛАЗМОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ: ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ

А.И. Минибаев, С.С. Харинцев, А.В. Харитонов

Институт Физики Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия

ajdiminibaev@stud.kpfu.ru

Усиление света и преобразование его в тепловую энергию в наноструктурах играет важную роль во многих прикладных областях, например, термофотовольтаике, фотокатализе, магнитной записи информации и др. [1]. На сегодняшний день основными материалами в плазмонике являются благородные металлы: Au, Ag и композиты: TiN, AZO. Они демонстрируют высокую избирательность усиления света по частоте падающего излучения. Но данный факт создает ограниченное, невозможность использования подобных материалов в устройствах, где необходимо усиливать и преобразовывать свет в заданной области длин волн. Возможный способ обхода этой проблемы, заключается в использовании материалов, у которых реальная часть диэлектрической проницаемости неизменна в континууме длин волн.

В данной работе, в ходе теоретических исследований установлено, что подобные плазмонные среды могут быть использованы при создании широкополосных устройств в фотоники. При этом область применения ограничивается такими приложениями, где не требуется усиление ближних оптических полей. Примером могут служить плазмонные метаустройства, принцип которых основан на явлении фазовой модуляции света. Добротность плазмонного резонанса в материалах со спектрально вырожденной диэлектрической проницаемостью оказывается исчезающе малой, что связано с временной локальностью электронного отклика.

1. A.V. Kharitonov et al. // Opt. Mater. Express, **10**(2), 513-531 (2020)

ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ИОДИДА МЕДИ С 10-(ПАРАХЛОРФЕНИЛ)ФЕНОКСАРСИНОМ И 10-(ПАРАХЛОРФЕНИЛ)ФЕНАРСАЗИНОМ - НОВОГО ПЕРСПЕКТИВНОГО ЛЮМИНЕСЦЕНТНОГО МАТЕРИАЛА СО СВЕЧЕНИЕМ В "ЗЕЛеноЙ" ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Д.Р. Муксеева^a, А.Б. Добрынин^{a,b}

^a Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева - КАИ, Казань, Россия

^b ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

dilara19mks@gmail.com

Методом рентгеноструктурного анализа были исследованы два комплекса иодида меди с 10-(парахлорфенил)феноксарсином и 10-(парахлорфенил)фенарсазином. В случае с 10-(парахлорфенил)феноксарсином образуется комплекс с иодидом меди Cu_2I_2 (Рис.1), а в случае с 10-(парахлорфенил)фенарсазином – с иодидом меди Cu_4I_4 (Рис.2).

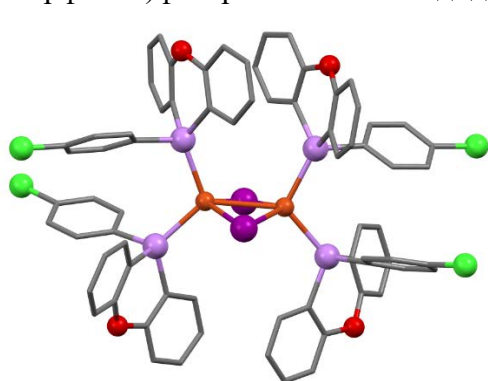


Рисунок 1

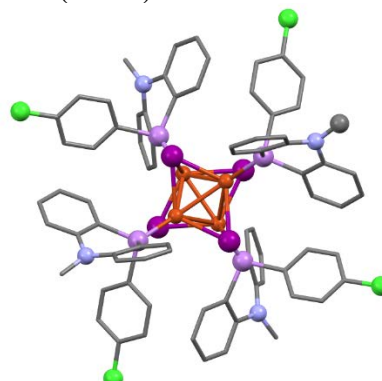


Рисунок 2

Комплекс 10-(парахлорфенил)фенарсазина с иодидом меди Cu_4I_4 обладает люминесцентными свойствами со свечением в «зеленой» области спектра.

В данной работе были исследованы молекулярные и кристаллические структуры данных комплексов и выяснены вероятные причины люминесценции только в комплексе с иодидом меди Cu_4I_4 .

ИЗУЧЕНИЕ ВЫСОКОСПИНОВЫХ СОСТОЯНИЙ ОПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗУЕМЫХ ЦЕНТРОВ В ДВУМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ hBN, ПЕРСПЕКТИВНОМ МАТЕРИАЛЕ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Ф.Ф. Мурзаханов, И.Н. Грачева, Г.В. Мамин, М.А. Садовникова, М.Р. Гафуров

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

murzakhanov.fadis@yandex.ru

Одним из основных критериев применимости оптически активных дефектов в широкозонных полупроводниках для развития квантовых технологий, является наличие у дефекта канала спин-зависимой рекомбинации под действием оптической накачки, приводящего к преимущественному заселению одного из спиновых подуровней дефекта. Данное свойство позволяет конвертировать спиновое состояние дефекта в оптический квант посредством сканирования микроволновой частоты – возбуждение переходов электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) между электронными спиновыми подуровнями, открывая возможность считывания спина посредством оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) [1]. В качестве оптически активных дефектов представляется широкий класс так называемых ван-дер-Ваальсовых (вдВ) материалов, и в особенности гексагональный нитрид бора (hBN), который благодаря сверх-широкой запрещённой зоне ($E_g \approx 6$ eV) [2] способен содержать дефекты, активные в диапазоне от УФ вплоть до ИК. Присущая гексагональному нитриду бора sp^2 -гибридизация приводит к образованию двумерных слоёв, атомы в которых связаны прочными плоскостно-тригональными ковалентными σ связями, в то время как сами 2D слои связаны между собой слабыми силами ван-дер-Ваальса [3].

В данной работе методами ЭПР/ДЭЯР спектроскопии были исследованы величины сверхтонкого взаимодействия вакансии бора V_B с тремя эквивалентными ядрами азота с угловой зависимостью. В результате были установлены все составляющие тензора сверхтонкой структуры ($A_{xx} = 47$ МГц, $A_{yy} = 47$ МГц и $A_{zz} = 85$ МГц) вместе с величиной квадрупольного взаимодействия $C_q = 1.96$ МГц и $\eta = 0.07$. Исследованы вторые координационные сферы, а именно электрон-ядерные взаимодействия между V_B и $^{10,11}B$. Экспериментально получены и смоделированы осцилляции Раби магнитного момента центра окраски.

1. Awschalom D. D. et al. Quantum technologies with optically interfaced solid-state spins // Nature Photonics. – 2018. – Т. 12. – №. 9. – С. 516-527.
2. Suter D. Optical detection of magnetic resonance //Magnetic Resonance. – 2020. – Т. 1. – №. 1. – С. 115-139.
3. Breeze, J. D., Salvadori, E., Sathian, J., Alford, N. M., & Kay, C. W. (2018). Continuous-wave room-temperature diamond maser. Nature, 555(7697), 493-496.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛЯРНОГО УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ, РАСПЫЛЕННЫХ С ПОВЕРХНОСТИ ГРАНИ (001) Ni

А.И. Мусин^а, В.Н. Самойлов^б

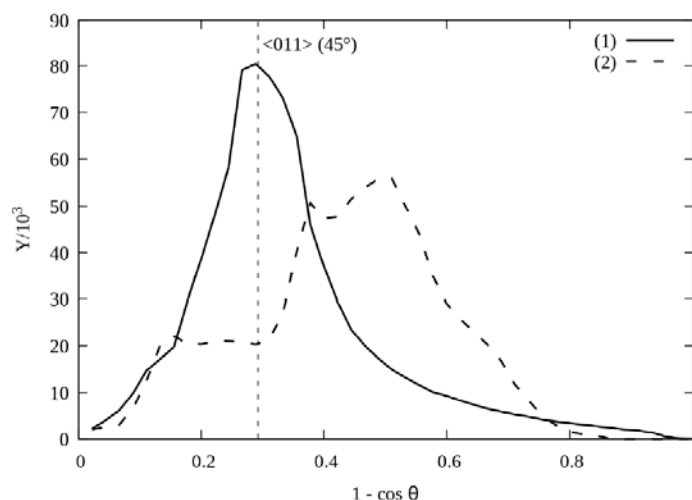
^а *Московский государственный областной университет, Москва, Россия*

^б *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

ai.musin@physics.msu.ru

На основе модели [1] была создана молекулярно-динамическая модель, в рамках которой проводилась бомбардировка монокристаллического блока (001) Ni из 4032 атомов ионами Ar с энергией 200 эВ при температуре 300 К.

На рисунке показано распределение распыленных атомов по полярному углу наблюдения (1) и начальному полярному углу (2), который определялся для каждого эмитируемого атома при пересечении плоскости, расположенной на 0,3 Å выше усредненной поверхности кристалла. В конечном распределении (1) наблюдается максимум в направлении на пятно Венера (вблизи 45°), однако в начальном распределении (2) этот максимум вблизи 45° отсутствует. Можно заключить, что механизм формирования максимума распределения не каскадный, а поверхностный. Этот вывод согласуется с результатами, полученными нами ранее по модели, в рамках которой учитывался только верхний слой атомов монокристалла.



Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [2].

1. G.V. Kornich, G. Betz. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*. 1998. V. 143. No. 4. P. 455-472.
2. V.I. Voevodin et al. *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2019. V.6. No. 2. P. 4-11.

СИНТЕЗ И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО ОКСИДА $Mg_{0.2}Co_{0.2}Ni_{0.2}Cu_{0.2}Zn_{0.2}O$

В.Ф. Мусин, А.Л. Зиннатуллин, М.А. Черосов, А.Г. Киямов, Ф.Г. Вагизов

Институт физики, Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия

vadim.211@mail.ru

Высокоэнтропийные оксиды (ВЭО) представляют собой однофазные твердые растворы, состоящие из пяти или более элементов в катионной подрешетке в пропорциях близких к эквивалентным [1]. Их особенностью является то, что они проявляют функциональные свойства, возникающие в результате сложного взаимодействия компонентов. Например, магнитные корреляции в ВЭО определяются координацией, валентностью, спиновым состоянием и типом катионов металлов, находящихся в кислородном окружении. Следовательно, чрезвычайно большое разнообразие ионных конфигураций вносит ощутимый вклад в магнитные свойства этих систем [2]. В данной работе был синтезирован и исследован высокоэнтропийный оксид состава $Mg_{0.2}Co_{0.2}Ni_{0.2}Cu_{0.2}Zn_{0.2}O$. Данный материал перспективен в качестве анода в литий-ионных батареях, так как по предварительным исследованиям показывает гораздо лучшую стабильность по сравнению с используемыми на данный момент анодами, например, на основе Co_3O_4 [3].

Стехиометрическое соотношение оксидов MgO , CoO , NiO , CuO и ZnO в виде порошка были тщательно перемешаны в агатовой ступке в течение 2,5 часов. Затем, полученный порошок был спрессован в несколько таблеток массой ~ 500 мг одноосным давлением ~ 4000 атм. в течение 15 минут. Таким образом было подготовлено несколько образцов, которые спекались в печи в течение 24 часов при различных температурах: 1000 °С, 1050 °С, 1100 °С. После спекания таблетки были тщательно размолоты в агатовой ступке до состояния тонкого порошка для последующего исследования.

Методом рентгеноструктурного анализа были получены данные о фазовом составе и кристаллической структуре синтезированных образцов. На дифрактограмме исходной смеси порошков не обнаруживаются узкие рефлексы, что является следствием рентгеноаморфного состояния вещества. Было определено, что наиболее оптимальной температурой для синтеза является 1050 °С. Основная фаза, наблюдаемая на дифрактограмме этого образца, обладает кубической кристаллической структурой типа $NaCl$. Также обнаруживается небольшое содержание примесной орторомбической фазы типа $(Co,Mg)Cu_2O_3$.

1. C. Rost et al. Entropy-stabilized oxides. Nat. Commun. **6**, 8485 (2015).
2. A. Sarkaret al. Magnetic properties of high entropy oxides. Dalton Trans. **50**, 1973 (2021).
3. N. Qiu et al. A high entropy oxide ($Mg_{0.2}Co_{0.2}Ni_{0.2}Cu_{0.2}Zn_{0.2}O$) with superior lithium storage performance. Journal of Alloys and Compounds **777**, 767 (2019).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ РАСТВОРОВ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЕЩЕСТВ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ МЕТОДОМ ЯМР С ИГМП

Д.А. Парфенова^а, А.С. Гордеев^б, Д.Л. Мельникова^а

^а *Кафедра физики молекулярных систем, Институт физики,
Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

^б *Институт экологии и природопользования,
Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

daryaparfenova@mail.ru

В настоящее время вещества, обладающие пористой структурой, являются одними из наиболее перспективных материалов. Уникальная структура, представленная множеством пор и каналов, обуславливает их фильтрационные, адсорбционные и каталитические свойства. Для их эффективного использования в качестве катализаторов необходимо учитывать особенности пористых структур и протекающих в них процессов [1]. Одним из важнейших катализаторов является цеолит – кристаллический алюмосиликат [2].

Цель данной работы заключалась в изучении особенностей поступательной подвижности молекул жидкости в ограниченной среде на примере трех сред: цеолит, оксид алюминия, прокаленный песок. Кроме того, было изучено влияние присутствия биомолекул, таких как ксилоза и рамнолипиды, на трансляционную подвижность воды в пористой среде цеолита.

Исследуемые системы имели заданное распределение частиц по размеру, составляющее 1-10 мкм для цеолита и 10-100 мкм для оксида алюминия и прокаленного песка.

Работа выполнена на оборудовании Федерального центра коллективного пользования физико-химических исследований веществ и материалов (ФЦКП ФХИ) КФУ на ЯМР-спектрометре Bruker AVANCE 400 МГц, оптимизированного для микротомографии и самодиффузии.

1. Dubinin M.M.: *Advances in Colloid and Interface Science* **2**, 217-235 (1968)

2. Naber J.E., de Jong K.P., Stork W.H.J., Kuipers H.P.C.E., Post M.F.M.: *J. Studies in Surface Science and Catalysis* **84**, 2197–2219 (1994)

НОВЫЙ КОМПОЗИТНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА И СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИАМИНА: СИНТЕЗ, МОРФОЛОГИЯ И АГРЕГАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА

В.А. Прытков, А.А. Ханнанов, В.Г. Евтюгин, А.Р. Гатаулина, М.П. Кутырева

Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

swat151099@gmail.com

Наночастицы серебра (**AgNPs**) являются перспективными объектами для создания биоактивных композитов благодаря широкому спектру действия на патогенные организмы [1]. При создании материалов для биомедицинского применения большое значение имеет постоянство агрегационных характеристик и низкая полидисперсность частиц. Данную задачу можно выполнить путём синтеза наночастиц с применением соединений, способных выступать и в роли восстановителя, и в роли стабилизатора, что также позволит повысить чистоту наноматериала и снизить токсичность. Для этих целей могут быть использованы нетоксичные, биodeградируемые сверхразветвленные полиэфирные (СРП) и их производные, способные выступать в роли как восстановителя, так и стабилизатора наночастиц металла. Таким образом целью работы являлась оценка процессов формирования наночастиц серебра в матрице сверхразветвленного аминифункционализованного полиэфирополиола (**НВРЕ-РА**), а также оценка свойств композитного материала на основе **НВРЕ-РА**, допированного наночастицами серебра. На основе полученного полимера разработана методика одностадийного синтеза наночастиц серебра методом химического восстановления в растворах ДМСО и H₂O. Установлено, что формирование **AgNPs** в матрице **НВРЕ-РА** характеризуется наличием двух типов низкоразмерных кластерных интермедиатов. Увеличение мольного отношения Ag⁺:(NH(CH₂)₂NH₂)-фрагменты в синтезе приводит к смене механизма созревания наночастиц с дигестивного на прямой Освальдовский (Рис. 1а).

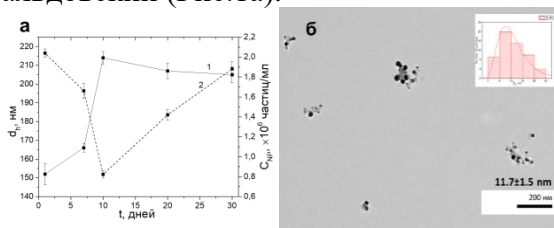


Рисунок 1 – Зависимость изменения среднего значения гидродинамического диаметра (1) и концентрации (2) частиц **AgNPs-4** ($n_{\text{Ag}^+}:n_{\text{(NH(CH}_2)_2\text{NH}_2)\text{-фрагменты}}=1:4$) в водном растворе от времени (а) по данным НТА. Данные ПЭМ образца **AgNPs-4** (б) и диаграмма распределения частиц.

Синтезированный композитный наноматериал представляет собой агрегаты сверхразветвленного полиэфирополиамина, допированные нанокластерами или наночастицами **AgNPs** сферической симметрии (рис. 1б) с гранецентрированной кубической кристаллической решеткой. Увеличение начальной концентрации ионов серебра в синтезе и замена растворителя от ДМСО к H₂O приводит к увеличению диаметра наночастиц серебра. Гидродинамический диаметр агрегатов и диаметр частиц составляют 34-90 нм и 7-14 нм соответственно. Разработанный подход позволит синтезировать широкий круг композитных наноматериалов на основе сверхразветвленных аминифункционализованных полиэфиров с потенциальной биоцидной активностью.

1. Vishwanath, R. Conventional and green methods of synthesis of silver nanoparticles and their antimicrobial properties / R. Vishwanath, B. Negi // Curr. Res. Green Sustain. Chem. – 2021. – V. 4. – Reg. 100205. <https://doi.org/10.1016/j.crgsc.2021.100205>

СОЗДАНИЕ МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩЕЙ НАНОКОМПОЗИТНОЙ ПОВЕРХНОСТИ СТЕКЛОУГЛЕРОДА

Е.А. Соловьев^{a,b}, П.Я. Эндерс^{a,b}, Т.П. Султанов^b, К.В. Холин^{a,b}

^a *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань, Россия*

^b *Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

evgeniy.solovev.anatolevich@mail.ru

Электрокаталитическое расщепление воды с использованием возобновляемых источников энергии для получения чистого H₂ можно рассматривать как перспективу в развитии энергетики, что приводит к необходимости создания и использования электрокатализаторов из недорогих металлов [1]. Существует множество способов нанесения на электрод катализаторов. Предлагаемый нами способ заключается в нанесении на поверхность стеклоуглерода 20 мкл наноконструкта, содержащего комплекс пектата натрия с марганцем, VulkanXC72 и жидкий Nafion. На рис.1 показано изображение поверхности стеклоуглерода, исследованной с помощью СЭМ.

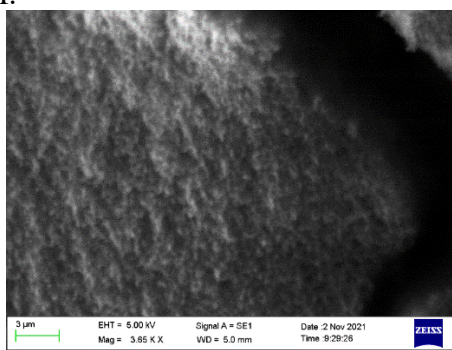


Рисунок 1 – Морфология марганецсодержащей поверхности стеклоуглерода.

Поверхность проявляет каталитические свойства в реакции восстановления воды, снижая перенапряжение реакции на 300 мВ и обеспечивая высокую плотность тока.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

1. You B. et al. Innovative Strategies for Electrocatalytic Water Splitting // Acc. Chem. Res. – 2018. - Vol.51, Issue 7, p.1571-1580.

СИНТЕЗ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОКСИДОВ $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7:\text{Nd}^{3+}$ и $\text{SrY}_2\text{O}_4:\text{Sm}^{3+}$

С.В. Стажарова, И.В. Романова, Р.В. Юсупов, М.А. Черосов, А.Г. Киямов, Р.Г. Батулин

Институт физики КФУ, Казань, Россия

sstazharova@bk.ru

Оксиды пироклора-предмет обширных исследований из-за их удивительных магнитных свойств, вызванные геометрической фрустрацией, которая появляется из-за расположение магнитных ионов в решетке [1]. Пироклоры, соединения типа $\text{R}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ (где R-редкоземельный ион) имеют гранецентрированную кубическую структуру с пространственной группой симметрии $Fd\bar{3}m$ [2]. Оксиды $\text{SrY}_2\text{O}_4:\text{R}^{3+}$ тоже являются фрустрированными магнетиками, пространственная группа симметрии которых- орторомбическая P_{nam} [3].

Образец $(\text{La}_{1-x}\text{Nd}_x)_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ ($x=2\%$) был синтезирован методом твердофазной реакции. Монокристалл SrY_2O_4 , легированный ионами Sm^{3+} (2 %), выращивали методом зонной плавки с оптическим нагревом. Контроль химического состава и степень Rкристалличности образца осуществлялся с помощью рентгеноструктурного анализа.

Экспериментальные данные по измерению температурных и полевых зависимостей намагниченности порошка были получены методом вибрационной магнитометрии на установке $PPMS^{\text{®}}$ в диапазоне температур $T = 5-305$ К и полей $B = 0-9$ Тл. В работе моделировались полевые зависимости намагниченности образца $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7:\text{Nd}^{3+}$, путем диагонализации одноионного гамильтониана. Учитывались энергия свободного иона, кристаллическое электрическое поле, зеемановское взаимодействие с локальным полем. Для порошка $(\text{La}_{0.98}\text{Nd}_{0.02})_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ выявлено хорошее качественное согласие между экспериментальными данными и расчетами. Впервые наблюдалось аномальное поведение магнитного момента Nd^{3+} в микропорошке $(\text{La}_{0.98}\text{Nd}_{0.02})_2\text{Zr}_2\text{O}_7$. Выявлен гистерезис в форме бабочки при температуре 5 К. Был получен и проанализирован спектр ЭПР, построена его температурная зависимость.

1. M.J. Harris., et al. "Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$." *Physical Review Letters* 79.13 (1997): 2554.
2. M.C. Hatnean, et al. "Structural and magnetic investigations of single-crystalline neodymium zirconate pyrochlore $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$." *Physical Review B* 91.17 (2015): 174416.
3. W. Rongfei, et al. "Dual-emitting SrY_2O_4 : Bi^{3+} , Eu^{3+} phosphor for ratiometric temperature sensing." *Journal of Luminescence* 216 (2019): 116737

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ МИКРОПОРИСТЫХ СИЛИКАТОВ УРАНИЛА

Я.Г. Тагирова

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

st069121@student.spbu.ru

Актуальность изучения силикатов шестивалентного урана связана с их устойчивостью в широком диапазоне физико-химических условий и способностью к ионно-обменным реакциям, имеющим важное значение в миграции продуктов ядерного деления [1,2]. Способность уранил силикатов поглощать токсичные и радиоактивные элементы обусловлена строением их кристаллических структур, а именно наличием систем крупных каналов.

Целью данного исследования является разработка методики синтеза новых силикатов уранила и их кристаллохимическое изучение.

В работе предложен метод высокотемпературного синтеза из расплава в вакуумированных кварцевых ампулах при температурах 700-1100 °С. Методика позволяет получать широкий спектр фаз, в том числе и соединения, структуры которых построены на основе микропористых каркасов [3].

Полученные в процессе синтезов кристаллы исследованы с использованием монокристалльного дифрактометра Rigaku XtaLAB Synergy-S и растрового электронного микроскопа-микроанализатора Hitachi TM3000. Структуры новых силикатов уранила $(K,Rb)_2[(UO_2)(Si_{10}O_{22})]$, $[A_3Cl][(UO_2)(Si_4O_{10})]$ ($A = Rb^+, Cs^+$) и $Rb_2[(PtO_4)(UO_2)_5(Si_2O_7)]$ представляют собой каркас с системами каналов, размером до 20 Å. В соединении $Rb_2O(UO_2)_2O(Si_3O_8)$, эффективный диаметр каналов каркаса равен 12 Å. В рамках доклада будут подробно описаны методики синтеза и особенности полученных соединений.

1. Buns P.C. *J. Nucl. Mater.*, 1999, 265, 218-223.
2. Zolotarev, A.A., Krivovichev, S.V., Avdontseva, M.S. *Minerals as Advanced Materials II*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2011, 163–166.
3. Babo J., Albrecht-Schmitt T.E. *Sol. St. Chem.* 2013, 197, 186-190.

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОТОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН, ПОЛУЧЕННЫХ ПУТЁМ РАДИАЦИОННОГО МОДИФИЦИРОВАНИЯ ИОНАМИ ГЕЛИЯ С ЭНЕРГИЕЙ 28 МэВ

А.А. Фоми^н, В.Н. Кизеева, Д.Ю. Олейников, П.О. Терёшкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

aaf42@tpu.ru

Наиболее перспективными и экологически чистым источником электрической энергии является водородная энергетика, использующая в своей основе водород и углеводородное топливо. Запасы водорода можно считать практически неиссякаемыми, ведь его главным источником является вода, но могут быть газ, уголь, биомасса, причем как растений, так и отходов. Для генерации энергии из молекул водорода используются топливные элементы (ТЭ).

ТЭ это устройства, способные осуществлять прямое преобразование химической энергии в электрическую. Коэффициент полезного действия таких устройств может достигать до 90%. Однако, широкое внедрение топливных элементов с полимерной электролитной мембраной пока задерживается из-за высокой стоимости вырабатываемого электричества. В топливных элементах одними из самых дорогих компонентов являются катализатор и протонопроводящая мембрана (ПОМ) [1]

На сегодняшний день наиболее широко распространенной является мембрана Nafion, производимая фирмой DuPont, стоимость более 1000 \$ за 1 м². Протонная проводимость мембраны – одна из основных характеристик ПОМ. В связи с экономическими санкциями отсутствует возможность приобретения мембран «Нафийон».

Настоящая работы посвящена исследованию протонной проводимости принципиально новых ПОМ, полученных путем радиационно-химической модификации коммерчески доступных полимеров поливинилиденфторида (PVDF) и этилентетрафторэтилен (ETFE).

Мембраны облучались высокоэнергетическим пучком ионов гелия и протонов, дозами (1-3) МГр. Облученные образцы затем обрабатывались химически. Гравиметрическим методом определяли влагопоглощение мембранных образцов сухих и увлажненных мембран. Протонная проводимость определялась методом импедансометрии, в специально разработанной ячейке из титана. Исследовались образцы мембран из полимера «Nafion», PVDF и ETFE. В таблице 1 представлены результаты исследований.

Таблица 1 – Результаты исследований

№ образца	Материал образца	Влагопоглощение, %	G, мСм/см
1	Nafion	80	53
2	ETFE	50	61
3	ETFE	50	83
4	PVDF	60	26

1. Sokhoreva, Valentina, Dyussebekova, Akbota Polymer membranes for hydrogen fuel cells // КЕМ.- Т.- 743, с 297 – 302.- 2017.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИТОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ ПРИ РАЗЛИЧНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ НАПОЛНИТЕЛЯ В МАТРИЦЕ

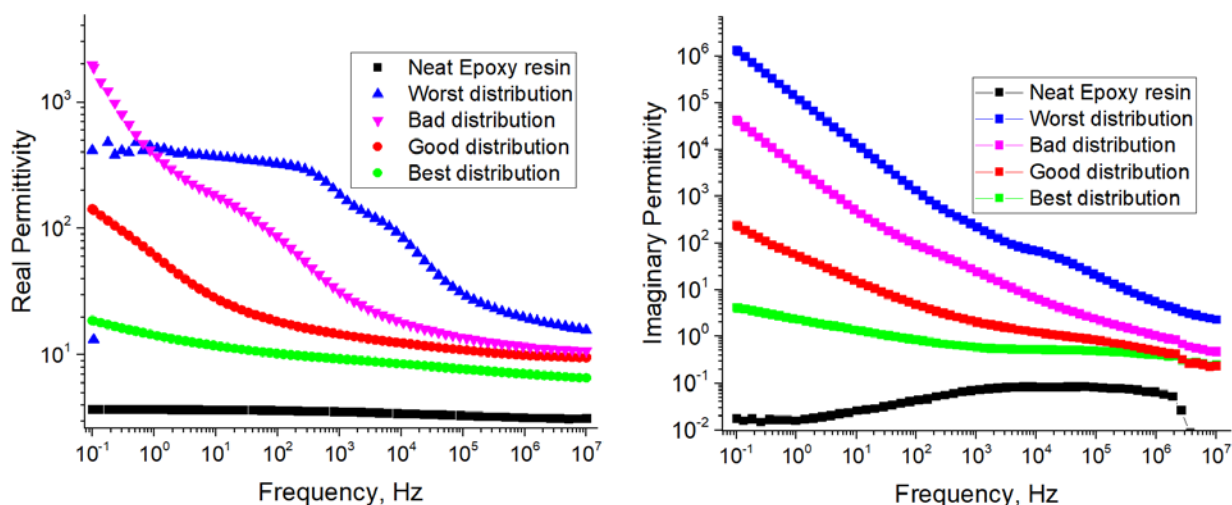
Т.Л. Хамидуллин, А.М. Димиев, И.В. Лунев.

Химический институт им.Бутлерова КФУ, Казань, Россия

LastEmber64@gmail.com

Для создания технологичного материала, применяемого для накопления энергии/электромагнитного экранирования необходимо регулировать то, как материал взаимодействует с электромагнитным излучением. Контроль подобных свойств удобно проводить через измерения диэлектрической проницаемости материала. Для увеличения диэлектрической проницаемости полимерных образцов, в них обычно добавляют проводящие частицы, Среди которых особый интерес вызывают наночастицы на основе углерода, в особенности одностенные углеродные нанотрубки (УНТ).

Для конечных свойств материала технология его изготовления может иметь большее значение, чем химический состав. Так, в данной работе было продемонстрировано влияние степени распределения наночастиц в матрице на итоговые свойства материала. Нам удалось достигнуть практически идеального распределения модифицированных УНТ в эпоксидной матрице. Было выявлено, что при улучшении распределения УНТ, то есть при повышении равномерности распределения, диэлектрическая проницаемость образцов значительно снижается. Таким образом, основной вклад в повышение диэлектрической проницаемости вносят агрегаты УНТ, а не отдельные нанотрубки.



ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЗВУКОВОГО ИМПЕДАНСА ДЕРЕВЯННОЙ ПАНЕЛИ

И.В. Храмов, А.А. Ступина

ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», Красноярск, Россия

igor.07.06@mail.ru

Перспективным направлением в конструировании звукопоглощающих материалов является древесина [1-3], т.к. древесина сама по своим физико-механическим свойствам пористый материал. Достигнуть более хорошего звукопоглощения можно применяя не только сборные конструкции, слоистые и др., а также за счет формы и размеров пор, угла расположения пор в деревянной панели.

Проведено исследование звукопоглощающих свойств строительных конструкций – панелей, изготовленными по CLT технологии.

В результате исследований выявлено, что акустический импеданс композитной звукопоглощающей CLT-панели выше, чем массивной панели CLT. Также определено отличие звукового сопротивления при противоположном направлении прохождения звука относительно внутренних параболических полостей. Установлено, что внутренние полости являются резонаторами мгновенного действия, а ограждающие CLT конструкции (стены, перекрытия) с внутренними параболическими полостями (при условии $D=L=35$ мм), кратно снижают уровень шума. Кроме того, единичную полость резонатора CLT-панели «звукового кармана», образованного параболоидом и плоскостью ламели древесины, можно рассматривать как модуль или отдельный конструктивный элемент звукопоглощения. Это позволит производить планирование и расчет звукозащиты из CLT-панелей с учетом модульного проектирования и снизить шум до допустимых норм.

Участие в конференции осуществлено при поддержке КГАУ «Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности» № 2022052508716.

1. Методы определения характеристик звукопоглощения строительных материалов и звукоизоляции конструкций (обзор) / Р. С. Федюк, А. В. Баранов, Р. А. Тимохин, А. П. Свинцов // Вестник Инженерной школы Дальневосточного федерального университета. – 2020. – № 4(45). – С. 125-139. – DOI 10.24866/2227-6858/2020-4-13. – EDN RXYLBK.
2. Преимущества использования древесины в строительстве / В. А. Хачатрян, Д. В. Зюганов, Д. Н. Терещенко, М. А. Дежин // Научные достижения и открытия современной молодёжи: сборник статей V Международной научно-практической конференции, Пенза, 17 ноября 2018 года / Ответственный редактор Г.Ю. Гуляев. – Пенза: МЦНС «Наука и Просвещение», 2018. – С. 20-23. – EDN YQZWKD.
3. Радоуцкий В.Ю., Шульженко В.Н., Степанова М.Н. Современные звукопоглощающие материалы и конструкции / Вестник Белгородского государственного технологического университета им. В.Г. Шухова. – 2016. – № 6. – С. 76-79. – EDN VWZDJJ.

ПРИЗМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НОВОГО МАТЕРИАЛА-АУКСЕТИКА

Цуркан А.

ФГБОУ НИУ МАИ, МБОУ «СОШ №12», Королёв, Московская область, Россия

piti55@bk.ru

В настоящее время необходимость изучения материалов-ауксетиков связана с созданием принципиально новой продукции. Ауксетиками называют материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона. При растяжении обычного материала в продольном направлении, происходит сжатие образца в поперечном направлении, но для материала-ауксетика наблюдается противоположное явление. Классическим примером ауксетика служит известная модель [1]. Такая модель приводится практически во всех работах по ауксетикам [1,2,3]. Цель исследования заключается в создании трёхмерной призматической структуры ауксетика. Кубическая трёхмерная структура тоже известна [3]. В этой работе задача похожая, но требуется предложить призму, кольцо, трубку, цилиндр, которые при растяжении вдоль продольной оси увеличат диаметр поперечного сечения. Решение задачи началось самым простым и очевидным способом. За основу была взята классическая модель двумерного ауксетика. Склейка звеньев проведена не в одной плоскости, а с постоянным углом поворота друг относительно друга. Изготовлены модели ауксетиков с различным числом боковых граней в призме, от четырёх до двадцати. Цель работы достигнута, предложена призматическая модель трёхмерной структуры ауксетика. Следующий этап работы – измерение коэффициентов Пуассона предложенных моделей.

1. Ауксетика – материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона. СПбГУ. – Электронный ресурс: https://vk.com/video-3519369_163344968
2. Лаврентьев С.Ю., Лисовенко Д.С., Ченцов А.В. Механические свойства двумерной ауксетической конструкции / Сборник трудов. Международная молодёжная научная конференция "44-е Гагаринские чтения 2018". - М.: НИУ МАИ, 2018. - С. 76-78.
3. Екимовская В.А. Механизм Саррюса с внутренним сложением - модель ауксетика / Г12 "Гагаринские чтения - 2020": Сборник тезисов докладов. - М.: МАИ, 2020. - 1731 с. - ISBN 978-5-4465-2716-8. - УДК 629.7.01. - ББК 39.6 Г12. - С.1150-1152. - Электронный ресурс: <https://gagarin.mai.ru/files/2020/abstracts2020.pdf>

БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ ОКСАЗОЛИДИНОНОВОГО РЯДА, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ ПРОИЗВОДНЫХ ВИТАМИНА В₆

Д.В. Иванова, Е.С. Булатова, М.Н. Агафонова, Т.Р. Азметов, С.В. Сапожников,
Н.В. Штырлин, Ю.Г. Штырлин

НОЦ фармацевтики КФУ, Казань, Россия

DaryaIvanova@stud.kpfu.ru

Развитие резистентности и дальнейшая невосприимчивость бактериальных клеток к известным на сегодняшний день препаратам является одной из главных проблем современного здравоохранения. По этой причине актуальной задачей медицинской химии является направленный синтез и поиск новых биомишеней для различных классов органических соединений, способных преодолевать множественную лекарственную устойчивость микроорганизмов.

В настоящей работе в 8-9 стадий были синтезированы и исследованы на антибактериальную активность *in vitro* на музейных штаммах (*S. aureus* ATCC 25923, *S. epidermidis* ATCC 14990, *B. subtilis* ATCC 6633, *E. coli* ATCC 25922, *K. pneumonia* ATCC 13883, *P. aeruginosa* ATCC 27853) новые соединения оксазолидинонового ряда, содержащие фрагмент витамина В₆ (шифры OZD-1, OZD-2 и OZD-3). Было показано, что соединение OZD-3 проявило активность (МИК = 16-64 мкг/мл) в отношении грамотрицательных микроорганизмов, что не характерно для соединений оксазолидинонового ряда, активных только в отношении грамположительных бактерий. При этом, исследуемые соединения, как и антибактериальный препарат линезолид, не обладают цитотоксичностью по отношению к условно-нормальным клеткам человека (Wi-38, HSF, MSC, CHL). Также для OZD-1, OZD-2 и OZD-3 было продемонстрировано отсутствие генотоксичности в SOS-хромотесте.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM-2022-0018.